

Untersuchung der Isotopenentmischung
in Trenndüsen
mit Berücksichtigung auftretender
Nichtgleichgewichtseffekte

Doktorarbeit

zur Erlangung des Grades
Doktor-Ingenieur
der Abteilung für Maschinenbau
der Ruhr-Universität Bochum

von

Wolfgang Schwan

Peine

Bochum 1983

1984



**Untersuchung der Isotopenentmischung
in Trenndüsen
mit Berücksichtigung auftretender
Nichtgleichgewichtseffekte**

Doktorarbeit

zur Erlangung des Grades
Doktor-Ingenieur
der Abteilung für Maschinenbau
der Ruhr-Universität Bochum

von

Wolfgang Schwan

Peine

Bochum 1983

Doktorarbeit eingereicht am: 30. Dezember 1983
Tag der mündlichen Prüfung: 10. Februar 1984
Referent: Prof. Dr.-Ing. M. Fiebig
Koreferent: Prof. Dr.-Ing. K. Gersten

Die vorliegende Arbeit entstand in den Jahren 1979 bis 1983 auf Anregung von Herrn Prof. Dr.-Ing. M. Fiebig während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Angestellter am Institut für Thermo- und Fluidodynamik der Ruhr-Universität Bochum.

Ich möchte mich bei allen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des Instituts bedanken, die zum guten Gelingen dieser Arbeit durch Gesprächsbereitschaft, wertvolle Hinweise, technische Unterstützung und Freundschaft beigetragen haben.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr.-Ing. Fiebig für die Betreuung und Förderung der Arbeit sowie für die zahlreichen kritischen und für mich sehr lehrreichen Diskussionen.

Herrn Prof. Dr.-Ing. Gersten danke ich sehr für das große Interesse, das er dieser Arbeit mit der Übernahme des Koreferats entgegenbrachte.

Nicht zuletzt hat die feinfühlig psychologische Betreuung meiner lieben Frau diesen Erfolg ermöglicht.

Bochum, im Februar 1984

Wolfgang Schwan



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41546407_0042

Für meine Eltern
und für Ulrike

Zusammenfassung

Die bei den Strömungs- und Transportvorgängen ternärer Gasgemische mit hoher Massendifferenz zwischen den schweren Komponenten und dem leichten Trägergas im Knudsenzahlbereich 10^{-2} in Standardtrenndüsen auftretenden einzelnen Nichtgleichgewichtseffekte und ihre Auswirkungen auf die Isotopenentmischung wurden mit Monte Carlo-Methoden an Modellgasen separat untersucht.

Die Ergebnisse der Tracer-MC-Simulationen für Spurenkonzentrationen der Isotope lassen erkennen, daß Diffusionsgeschwindigkeiten der Isotope in Radialrichtung in der Größenordnung der Isotopenschallgeschwindigkeit auftreten. Die vorübergehende Temperaturerhöhung im Anlaufbereich übersteigt für das Isotopengemisch sogar bei einer Knudsenzahl von 0,02 die Gleichgewichtstemperatur um den dreifachen Wert. In der Nähe der Umlenk wand können die, entsprechend den Experimenten und theoretischen Abschätzungen erwarteten, Störungen der Geschwindigkeitsverteilungsfunktionen der schweren Gemischkomponenten mit den Berechnungen direkt nachgewiesen werden. Eine Zunahme der Knudsenzahl erhöht die Nichtgleichgewichtseffekte und reduziert den Trenneffekt im Vergleich zu Ergebnissen einer vereinfachten Kontinuumslösung. Für die gaskinetische Betrachtungsweise bildet die Anlaufkennzahl keinen Parameter des Stofftrennproblems.

Im Vergleich zur Tracer-MC-Simulation mit festvorgegebenem Trägergasfeld simuliert die vollständige MC-Methode auch die Bewegung des Trägergases bei erhöhter Isotopenkonzentration. Die zusätzliche Diffusion des Trägergases vergrößert das transitorische Überschwingen des Trenneffekts über den Gleichgewichtswert gegenüber der Berechnung mit der Tracer-MC-Methode.

Inhaltsverzeichnis

	Seite
1. Einleitung und Problemstellung	1
2. Simulationsmethode zur Erfassung von Nichtgleichgewichtseffekten	9
2.1. Vollständige Monte Carlo-Simulation	9
2.2. Monte Carlo-Simulation bei sehr kleinen Isotopenkonzentrationen	12
2.3. Beschreibungsmöglichkeiten der Isotopenentmischung	15
3. Einfluß der Knudsenzahl auf das Nichtgleichgewicht und die Isotopentrennung für den Grenzfall hoher Machzahl und sehr kleiner Isotopenkonzentrationen	19
3.1. Geschwindigkeits- und Temperaturfeld	19
3.2. Geschwindigkeitsverteilungsfunktion	44
3.3. Isotopentrennung	49
4. Einfluß molekularer Verhältnisse und Randbedingungen auf die Isotopentmischung	60
4.1. Isotopengemischkonzentration	60
4.1.1. Eingefrorenes Trägergasfeld	60
4.1.2. Bewegung sämtlicher Gemischkomponenten	63
4.2. Massendifferenz der Isotope	77
4.3. Konzentrationsverhältnis der Isotope	82
4.4. Wandreflexion	86
4.5. Wandtemperatur	92

	Seite
5. Schlußbetrachtung	97
Literaturverzeichnis	102
Anhang I Relaxationszeiten der Modellgase	107
Anhang II Monte Carlo-Simulationsprogramm	113
Anhang III Fehlerbetrachtung bei der Berechnung des Trenneffekts	118

Verzeichnis häufig benutzter Symbole:

A	Trennfaktor
a	Kanalweite, kleinster Abstand zwischen innerer und äußerer Berandung der Strömung
D	Diffusionskonstante
d	Moleküldurchmesser
E	Energie
F	äußere Kraft
f	Geschwindigkeitsverteilungsfunktion
g	Beschleunigung
J	Stoßintegral
k	Boltzmann-Konstante
L	Moldurchsatz
m	Molekülmasse
$\tilde{m}$	relative Molekülmasse (Molekulargewicht)
N	Probengröße
n	Teilchendichte
p	Druck
R	Umlenkradius (Härtefunktion Kap. 3)
r	Radialkoordinate
T	Temperatur
t	Zeit
v	Geschwindigkeit
x	Koordinate normal zur Wand
$\tilde{x}$	Molanteil, Molkonzentration
y	Koordinate in Hauptströmungsrichtung
z	Koordinate in Richtung der Düsen Schlitzlänge

Griechische Buchstaben:

α	Thermodiffusionsfaktor
β	Kehrwert der thermischen Geschwindigkeit
γ	Verhältnis der spezifischen Wärmen
δ	relativer Fehler
ϵ_A	Elementareffekt der Isotopentrennung (Trenneffekt)
θ	Abschälverhältnis
λ	mittlere freie Weglänge
μ	Massenverhältnis
ν	Stoßfrequenz
τ	Relaxationszeit
ϕ	Umlenkwinkel
Ω	Stoßquerschnitt
ω	Winkelgeschwindigkeit

Dimensionslose Kennzahlen:

$Kn = \lambda/a$	Knudsenzahl
$M = v/(\gamma kT)^{1/2}$	Machzahl
$S = v/(2kT/m)^{1/2}$	Geschwindigkeitsverhältnis
$Pe = ReSc = v \cdot a/D$	Pecletzahl = Reynoldszahl $\cdot$ Schmidtzahl
$\phi/ReSc$	Anlaufkennzahl

Indices:

c	Trärgas (carrier gas)
e	Eintritt
G	Gemisch
h	schweres Isotop (heavy isotope)
I	Isotope ($h + 1$)
i	Komponente
in	Innenwand
j	Komponente
l	leichtes Isotop (light isotope)
lim	Grenzwert
max	maximal
p	Zellennummer
q	Richtung r , ϕ , z oder x , y , z
R	Umlenkradius
Rel	Relaxation
r	radial
s	Strömung
sek	starr elastische Kugel
T	Temperatur
u	Isotopengemisch (uranium isotope mixture)
w	Wand
x	normal zur Wand
y	in Hauptströmungsrichtung
z	in Richtung zur Düsen Schlitzlänge
θ	konstantes Abschälverhältnis
ϕ	azimutal

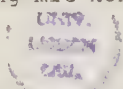
Hochgestellte Indices:

bin	binär
e	Eintritt
f	freie Molekularströmung
tern	ternär
∞	Gleichgewicht
†	Anlauf

1. Einleitung und Problemstellung

Die Energiebereitstellung mittels Leichtwasserreakorttechnologie verlangt die Anreicherung des im natürlichen Uranisotopengemisch mit 0,7 % vorhandenen spaltbaren leichten Uranisotops U^{235} auf einen Wert von ca. 3 %. Eine Möglichkeit dazu bietet das Trenndüsenverfahren, das wie das Gasdiffusions- und das Gaszentrifugenverfahren die Unterschiede der relativen Molekülmassen der Isotope ausnutzt und mit Uranhexafluorid UF_6 in der Gasphase arbeitet /1/. Im Gegensatz zum Zentrifugenverfahren, das die massenabhängigen Zentrifugalkräfte durch schnelle Rotation eines Hohlzylinders erzeugt, benutzt das Trenndüsenverfahren zur Stromlinienkrümmung die Umlenkung eines Gasstrahls an einer feststehenden Wand oder die gegenseitige Umlenkung mehrerer Gasstrahlen.

Abb. 1.1 zeigt eine schlitzförmige Standardtrenndüse mit konstantem Radius der Umlenkwand. In einem kontinuierlichen Prozeß expandiert ein ternäres Gasgemisch im konvergenten Teil auf Unterschall und wird in der zylindrischen Düse, die den Untersuchungsgegenstand der vorliegenden Arbeit darstellt, umgelenkt. Die Stromlinienkrümmung erzeugt einen Druckgradienten in Radialrichtung. Die Partialdichten der beiden schweren Komponenten steigen deshalb zur Umlenkwand hin an. Die größere Masse des schweren Isotops führt an der Umlenkwand zu einer höheren Konzentration im Vergleich zu der des leichten Isotops. Ein Abschäler teilt das Gasgemisch in eine mit Trägergas und leichtem Isotop angereicherte leichte Fraktion und eine an Trägergas und leichtem Isotop verarmte schwere Fraktion. Das Verhältnis aus dem Uranmolstrom der leichten Fraktion und dem Uranmolstrom des gesamten Gasstromes (L_u) bezeichnet man als Uranabschälverhältnis θ_u . Die vom Abschäler ausgehende und sich bis zum Düsen Eintritt fortsetzende Stromaufteilung mit konstantem Abschälverhältnis definiert die Molstromfläche.



Das die Isotopenentmischung bewirkende Zentrifugalfeld ist umgekehrt proportional dem Stromlinienradius und proportional dem Quadrat der Umfangsgeschwindigkeit. Deshalb werden kleine Umlenkradien und große

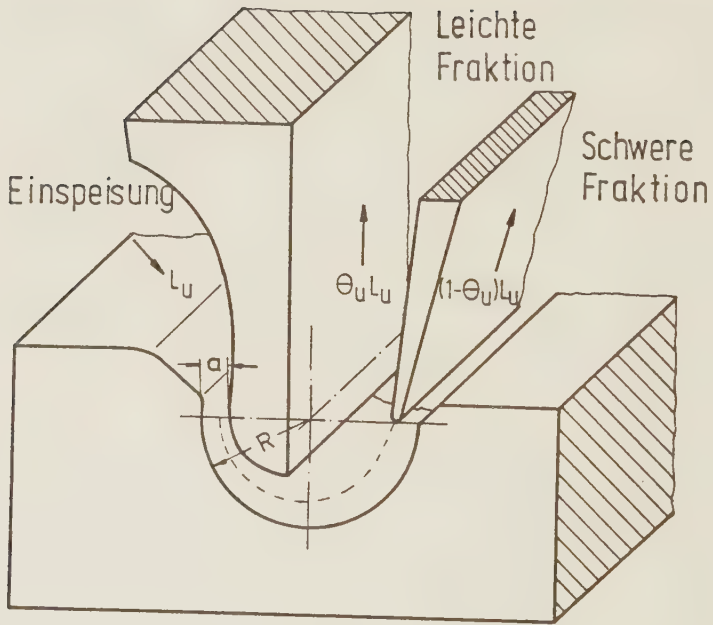


Abb. 1.1. Ansicht einer schlitzförmigen Standard-Trenndüse mit schematischer Darstellung der Stromaufteilung durch den Abschäler

Geschwindigkeiten angestrebt. In technischen Ausführungen ist der Umlenkradius von der Größenordnung $0,1 \text{ mm}$ /2/. Um hohe Geschwindigkeiten zu erreichen, wird ein leichtes Trägergas mit hohem Molanteil verwendet, z.B. $95 \% \text{ H}_2$. Dies erniedrigt die mittlere Masse des Gemisches und erhöht somit die Schallgeschwindigkeit. Ein Expansionsverhältnis von zwei genügt, um das UF_6 bereits bei einer Gemischmachzahl im hohen Unterschallbereich auf eine Strömungsgeschwindigkeit zu beschleunigen, die seine Ruheschallgeschwindigkeit mehrfach übersteigt.

Ein weiterer positiver Effekt des Trägergases beruht auf der unterschiedlichen Diffusionshemmung der beiden Isotope. Das schwere Isotop wird aufgrund seiner größeren Masse weniger durch das Trägergas gehemmt als das leichte Isotop und erreicht somit früher den Gleichgewichtszustand, der auf der Balance zwischen der die Dichtegradienten aufbauenden Druckdiffusion und der dieselben ausgleichenden Konzentrationsdiffusion beruht. Dadurch wird zwischenzeitlich ein Zustand der Isotopenentmischung erreicht, der größer ist als die Trennung der Isotope im Gleichgewichtszustand. Dieser als Überschwingen des Trenneffekts ϵ_A bezeichnete Vorgang ist bedeutend für die Wirtschaftlichkeit des Anreicherungsverfahrens, da die Trennleistung vom Quadrat des Trenneffekts abhängt /3/.

Das Überschwingen des Trenneffekts wurde erstmalig über die kontinuiersmäßige Beschreibung der Isotopenentmischung im Rahmen der Chapman-Enskog-Näherung von Becker u.ä. /4/ gezeigt. Für bekanntes Geschwindigkeits-, Temperatur- und Druckfeld wurde dabei das ternäre Diffusionsproblem unter Vernachlässigung von Thermo- und azimuthaler Diffusion numerisch gelöst.

Für sehr kleine Isotopenmolenbrüche reduziert sich das ternäre Diffusionsproblem auf zwei binäre Diffusionsvorgänge der einzelnen Isotope im Trägergas /5/. Die räumliche Änderung des Trenneffekts ist dann bei gegebener Geometrie, konstanter Temperatur und bekanntem Geschwindigkeitsprofil nur Funktion der Massenverhältnisse der Isotope zum Trägergas, des Geschwindigkeitsverhältnisses (Strömungsgeschwindigkeit zu wahrscheinlichster thermischer Geschwindigkeit)

und des Abschälverhältnisses des Isotopengemisches sowie einer Anlaufkennzahl $\phi/\text{ReSc} \sim \phi \cdot \text{Kn}$.¹ Bei einem konstanten Geschwindigkeitsverhältnis S_u ergibt sich längs einer Molstromfläche für den Trenneffekt eine funktionelle Abhängigkeit von der Anlaufkennzahl (Abb. 1.2). Das heißt, der Ablauf der Isotopenentmischung verschiebt sich bei zunehmender Reynoldszahl Re zu größerem Umlenkwinkel ϕ und umgekehrt. In einem Anlaufkennzahlbereich steigt mit zunehmendem Geschwindigkeitsverhältnis die Entmischung an und läuft bei gleicher Reynoldszahl schneller über den Umlenkwinkel ab. Das Überschwingen des maximalen Trenneffekts $\varepsilon_{\text{Amax}}$ über den Gleichgewichtstrenneffekt erfolgt erst ab einem bestimmten Geschwindigkeitsverhältnis. Für Geschwindigkeitsverhältnisse größer drei wird eine obere Grenze der Gleichgewichtsentmischung erreicht, bei der der Gleichgewichtstrenneffekt $\varepsilon_{\text{A}}^{\infty}$ nicht mehr vom Geschwindigkeitsverhältnis abhängt /6/.

Die azimutale Lage der maximalen Isotopenentmischung kann durch die Reynoldszahl und wegen der Abhängigkeit von der Teilchendichte durch eine entsprechende Anpassung des Druckniveaus gesteuert werden. Die kleinen Düsenabmessungen führen mit der Vorgabe der Einstellung des maximalen Trenneffekts am Abschäler nach experimentellen Untersuchungen zu Reynoldszahlen in der Größenordnung 100. Die entsprechenden Knudsenzahlen, die im Übergangsgebiet zwischen Kontinuums- und freier Molekularströmung angesiedelt werden können, liegen bei 10^{-2} . Diese Knudsenzahlen zusammen mit dem großen Massenverhältnis des UF_6 bezogen auf das leichte Trägergas H_2 von 176 sowie den hohen UF_6 -Machzahlen $M_u > 3$ führen bei der scharfen Stromlinienumlenkung zu Strömungsbedingungen, in denen Nichtgleichgewichtseffekte auftreten können. Als Nichtgleichgewichtseffekte werden starke lokale Unterschiede der Geschwindigkeiten und Temperaturen zwischen den Gemischkomponenten sowie Abweichungen von den Maxwell-Geschwindigkeitsverteilungen der Einzelkomponenten bezeichnet.

¹ Die Knudsenzahl, die das Verhältnis von mittlerer freier Weglänge zu einer charakteristischen Düsenabmessung bestimmt, wird für die gaskinetische Beschreibung der Entmischungsvorgänge benutzt.

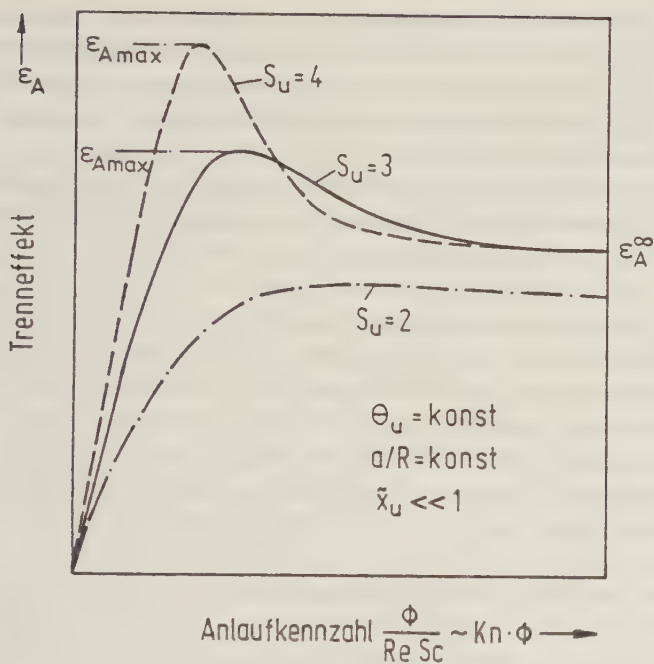


Abb. 1.2. Schematische Darstellung des Trenneffektverlaufs als Funktion der Anlaufkennzahl $Kn \cdot \phi$ in Abhängigkeit vom Geschwindigkeitsverhältnis S_u für konstantes Isotopengemischabschälverhältnis u_{Θ_u} .

Ziel der Arbeit ist die Untersuchung einzelner Nichtgleichgewichtseffekte, wie sie in Trenndüsenströmungen auftreten können, und die Bestimmung ihres Einflusses auf den Ablauf der Diffusionsvorgänge. Eine Ursache für Nichtgleichgewichtseffekte sind die hohen radialen Diffusionsgeschwindigkeiten, die an der Umlenk wand auf null abgebremst werden. Für typische Trenndüsen ist der Diffusionsvorgang bei einem Umlenkwinkel von π praktisch abgeschlossen. Bei einer Kanalbreite von $1/3$ des Umlenkradius ist demnach die mittlere Diffusionsgeschwindigkeit der Isotope etwa $1/8$ der Umfangsgeschwindigkeit. Für ein Massenverhältnis von $UF_6/H_2 = 176$, einen UF_6 -Molanteil von $0,05$ und eine Machzahl des Trägergases von $0,3$ ergibt sich eine Uran-Machzahl von etwa 4 und eine mittlere Urandiffusions-Machzahl von ungefähr $0,5$. Da die Radialgeschwindigkeit an der Wand null ist, sind die radialen Machzahlen im Maximum noch höher, und das plötzliche Abbremsen an der Wand führt zu Temperaturerhöhungen der schweren Isotope, die wegen des unzureichenden Energieaustausches mit dem Trägergas nicht sofort ausgeglichen werden. Einen weiteren Grund für Nichtgleichgewichtseffekte bildet das Abbremsen der Umfangsgeschwindigkeit an der Wand. Dieses Problem wird im Rahmen der vorliegenden Arbeit nicht behandelt. Stattdessen wird eine mitbewegte Wand betrachtet. Dies hat den Vorteil, daß sich asymptotisch für große Umlenkwinkel immer die bekannte Gleichgewichtslösung einstellen muß.

Experimentelle Untersuchungen mit Molekularsonden bestätigen das Auftreten von Nichtgleichgewichtseffekten /6,7,8/. Messungen von Ehrfeld /6/ und Bier u.a. /7/ an Modellgasen lassen darauf schließen, daß in Wandnähe die lokale Geschwindigkeitsverteilung von der Maxwell-Verteilung abweicht, wogegen zwei Maxwell-Halbraumverteilungen mit unterschiedlichen Geschwindigkeitsverhältnissen die Meßwerte gut anpassen. Untersuchungen mit molekular angeströmten Temperatursonden ergeben maximale Abweichungen der Gemischtemperatur von 14% gegenüber der Ausgangstemperatur des Modellgases und zeigen einen Temperatursprung an der Umlenk wand /8/.

Eine theoretische Erfassung von Nichtgleichgewichtseffekten ist von besonderem Interesse, da die Experimente verfahrensbedingt nur Unter-

schiede in den partiellen Geschwindigkeitsverhältnissen aufzeigen können, jedoch keine Aussage darüber zulassen, ob ein Nichtgleichgewicht hinsichtlich der Temperatur oder der Geschwindigkeit vorliegt /6/. Aussagen über das Gemischgeschwindigkeitsverhältnis sind nur möglich, wenn eine Annahme über die lokale Temperatur getroffen wird. Temperatursondenmessungen wiederum erfassen nur die Gemischtemperatur und können die erwarteten Unterschiede zwischen Trägergas und Isotopen nicht aufzeigen.

Die Abschätzung der Relaxationszeiten des binären Gemisches UF_6/H_2 , die den Zeitmaßstab des Ausgleichs einer auftretenden Störung in der Strömung angeben, führt bei typischen Trenndüsenbedingungen zu folgenden Ergebnissen: Die Relaxationszeit zum Ausgleich der Temperaturunterschiede zwischen den Komponenten ist zehnmal größer als die Relaxationszeit zum Ausgleich der Geschwindigkeitsunterschiede zwischen den Komponenten und dreimal größer als die Relaxationszeit der schweren Komponente zum Ausgleich von Abweichungen von der Geschwindigkeitsverteilung. Alle Relaxationszeiten außer der des Trägergases sind nicht mehr klein gegen die charakteristische Strömungszeit. Der physikalische Hintergrund dafür ist, daß für das große Massenverhältnis der Energieaustausch zwischen Isotopen und Trägergas nicht so effektiv ist wie innerhalb jeder Komponente. Aufgrund der hohen Stoßfrequenz bleibt das Trägergas im lokalen thermodynamischen Gleichgewicht, während das für die Isotope nicht gilt und starke Abweichungen von der Maxwellverteilung für das UF_6 auftreten können. Weiterhin werden sich die Temperaturen und Geschwindigkeiten von UF_6 und Trägergas unterscheiden (/9/ und Anhang I).

Die Beschreibung der Isotopenentmischung im Rahmen von Kontinuumsmodellen wird zumindest in der Nähe der Umlenkwand fragwürdig /9/. Die Navier-Stokes-Gleichungen können Temperaturunterschiede zwischen den Komponenten nicht erfassen und sind nur für Diffusionsgeschwindigkeiten gültig, die klein gegenüber der Schallgeschwindigkeit sind. Das Zweitemperatur-Modell wird für kleine Molanteile der schweren Komponente ungültig und gilt nur für kleine Abweichungen von einer Maxwell-Verteilung. Die Dreizehn-Momenten-Methode benutzt zur Lösung der Stoßintegrale Maxwellmolekül-Wechselwirkungen und es tre-

ten Schwierigkeiten bei der Formulierung der Randbedingungen für die höheren Momente auf.

Eine umfassende Beschreibung des Trenndüsenproblems ist nur über gaskinetische Modelle möglich, die die Boltzmann-Gleichung selbst bei starker Abweichung von der Maxwell-Geschwindigkeitsverteilung und in Gemischen mit großem Massenverhältnis lösen können. Die Monte Carlo-Simulationen sind solche Methoden. Zur Untersuchung der Isotopenentmischung wird für die zweidimensionale Strömung eine Tracer-Monte Carlo-Methode und für den eindimensionalen Fall (keine Diffusion in azimuthaler Richtung) eine vollständige Monte Carlo-Simulation gewählt.

Diese Methoden sind besonders geeignet, weil sie es gestatten, Nichtgleichgewichte hinsichtlich Temperatur- und Geschwindigkeitsunterschieden als auch der Geschwindigkeitsverteilungsfunktion mit noch vertretbarem Aufwand auf einem Kleinrechner zu erfassen, die Einflußgrößen (Knudsenzahl, Konzentration, Massenverhältnisse, Geschwindigkeitsverhältnisse) parametrisch zu variieren und die Auswirkungen der Einzeleffekte auf die Entmischung zu erkennen. Nichtgleichgewichtseffekte treten verstärkt auf mit zunehmender Gemischmachzahl und Knudsenzahl und mit abnehmendem UF_6 -Molanteil (Anhang I). Ein Vergleich der Isotopentrennung mit Ergebnissen von Kontinuumsberechnungen, die nur den Diffusionsschlupf erfassen, wird für Spurenkonzentration der Isotope mit der Tracer-MC-Simulation durchgeführt. Der Einfluß der Trennwirkung der Isotopenstöße mit der Umlenkwand bei unterschiedlicher Akkomodation (spiegelnde - diffuse Reflexion) und Wandtemperatur auf die Isotopenentmischung wird untersucht.

2. Simulationsmethode zur Erfassung von Nichtgleichgewichtseffekten

2.1 Vollständige Monte Carlo-Simulation

Ein ideales Modell für die Simulation von Trenndüsenvorgängen sollte es gestatten, die Nichtgleichgewichtseffekte wie Geschwindigkeits- und Temperaturunterschiede zwischen den einzelnen Komponenten des Gemischs sowie die Abweichungen von den Maxwellgeschwindigkeitsverteilungen und ihre Wirkungen auf den Trenneffekt bei unterschiedlichen Anfangs- und Randbedingungen zu erfassen. Im Prinzip wäre ein sehr vollständiges Monte Carlo-Verfahren in der Lage, diese Forderungen zu erfüllen. Das Monte Carlo-Verfahren als diskretes Partikelmodell löst die Boltzmanngleichung (2.1) direkt für alle realen Moleküle im Simulationsraum, wobei für die lokale Verteilungsfunktion keine Einschränkung gemacht wird.

$$\frac{\partial (nf)}{\partial t} + \vec{v} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} (nf) + \vec{F} \frac{\partial}{\partial \vec{v}} (nf) = J_{\text{Gewinn}} - J_{\text{Verlust}} \quad (2.1)$$

Dies ist jedoch praktisch noch sehr weit von den Möglichkeiten heutiger Rechner entfernt.

Während eines kleinen Zeitschrittes der Bewegung Δt_m , der klein gegen die mittlere Stoßzeit der Moleküle ist, lassen sich der Bewegungs- und Stoßvorgang eines betrachteten Moleküls entkoppeln. Die direkte Monte Carlo-Simulation nach Bird /10/ beschränkt sich wegen der Größe des Zeitschrittes auf verdünnte Gase im Übergangsbereich von der Kontinuumsströmung in Richtung freie Molekularströmung. Die Gesamtheit der Moleküle wird durch eine repräsentative Anzahl von Molekülen dargestellt, was zu einem statistischen Fehler in den Ergebnissen führt, der umso kleiner wird, je näher die reale Molekülzahl erreicht wird.

Die Lösung der Boltzmanngleichung erfolgt in zwei Phasen:
Die Berechnung der Molekülbewegung nach Newton'schen Bewegungsge-

setzen im physikalischen und Geschwindigkeitsraum während des Zeitschritts der Bewegung, die Verfolgung der Teilchenbahnen und Beachtung der Überschreitung der Grenzen des Simulationsraumes mit Berechnung von Stößen an festen Wänden nach vorgegebenen Reflexionsbedingungen löst die konvektiven Terme der linken Seite der Boltzmann-Gleichung.

Nach Abschluß der Bewegung erfolgt die Stoßberechnung der Zweierstöße. Dazu muß der Simulationsraum mit einem Zellennetzwerk überspannt werden, dessen Abmessungen kleiner sind als der mit der Fortpflanzungsgeschwindigkeit einer Störung während des Zeitschritts zurückgelegte Weg. Innerhalb einer Zelle erfolgt die Auswahl der Stoßpartner probabilistisch unabhängig vom tatsächlichen Ort mit einer Wahrscheinlichkeit entsprechend ihrer Relativgeschwindigkeit. Über die Aufsummierung des Zeitzählers der einzelnen Stöße für die Dauer des Zeitschritts der Bewegung gelingt die Lösung der rechten Seite der Boltzmann-Gleichung mit den Stoßintegralen für Gewinn und Verlust. Der Zeitzähler ist umgekehrt proportional zur Anzahl der Moleküle in der Zelle und zur Stoßfrequenz, die vom Wechselwirkungspotential abhängt. Für das Modell der harten Kugeln wird die Wahrscheinlichkeit eines Stoßes direkt proportional zur Relativgeschwindigkeit der Moleküle.

Werden die repräsentativen Moleküle entsprechend den Anfangsbedingungen am Eintritt in den Simulationsraum eingeführt, stellt sich allmählich ein stationärer Zustand ein, bei dem ebensoviele Moleküle in den Simulationsraum eintreten wie austreten. Nach Erreichen des stationären Zustands werden die makroskopischen Feldgrößen durch Summation über längere Zeiten aus den Daten der Einzelmoleküle und Mittelwertbildung berechnet. Dabei spielt es keine Rolle, ob der Mittelwert als Gesamtheits- oder zeitlicher Mittelwert gebildet wird. Die Probengröße N wird innerhalb des Sammelzeitraums durch die Summation der Anzahl der am Ende des Zeitschritts der Bewegung in einer Zelle anwesenden Moleküle über viele Zeitschritte gebildet. Bei großer Anzahl der Moleküle in der Zelle kann die Sammelzeit bis zum Erreichen gleicher Probengröße entsprechend verkürzt werden.

Der statistische Fehler der durch Summation direkt berechneten Feldgrößen folgt dem Gesetz $1/\sqrt{N}$ (Bird /11/ S. 123). Die Rechenzeit bei der

Simulation im Übergangsbereich zwischen Kontinuum und freier Molekularströmung, die durch die Stoßberechnung bestimmt wird, ist direkt proportional zur Probengröße.

2.2 Monte Carlo-Simulation bei sehr kleinen Isotopenkonzentrationen

Die Beschränkung der Isotopenkonzentration auf sehr kleine Anteile (Spurenkonzentration $\tilde{x}_u = 5 \cdot 10^{-2} \%$ gegenüber $\tilde{x}_u = 5 \%$) führt dazu, daß der Diffusionsvorgang der Isotope keine Rückwirkung auf das Trägergasfeld ausübt. Daraus resultiert die Möglichkeit, bei der Spurengassimulation (Tracer-MC-Simulation) das Trägergasfeld im gesamten Simulationsraum mit bekanntem Zustand vorzugeben. Die Vorgabe kann z.B. aus experimentell gewonnenen Geschwindigkeitsprofilen und konstanter Temperatur- und Dichteverteilung bestehen. Die Interpretation der Ergebnisse wird jedoch wesentlich erleichtert, wenn für das Trägergas eine bekannte Gleichgewichtslösung gewählt wird.

Für eine stationäre Gasströmung zwischen zwei mit gleicher Winkelgeschwindigkeit rotierenden Zylindern, deren Wandtemperaturen gleich groß sind, hat Morse /12/ gezeigt, daß die mittlere freie Weglänge in der Lösung keine Rolle spielt, wenn an den Wänden diffuse Reflexion entsprechend einer Maxwellverteilung bei vollständiger Akkommodation angenommen wird. Die Lösung $v = \omega R$, $T = \text{konst}$ und $n(R) = n(R_{in}) \exp [S_R^2 - S_{Rin}^2]$ hat für alle Knudsenzahlen Gültigkeit. Diese Lösung ist das zylindersymmetrische Analogon der barometrischen Höhenformel und eine Gleichgewichtslösung der Boltzmann-Gleichung.

Mit der Vorgabe obiger Gleichgewichtslösung für das Trägergas und bei entsprechender Bewegung der Wände des Simulationsraumes wird sich dann, ausgehend vom Gleichgewichtszustand am Kanaleintritt, im Anlaufgebiet für die mit kleiner Konzentration vorhandenen Isotope (Tracermoleküle) ein Nichtgleichgewicht entwickeln. Bei genügend großem Umlenkwinkel werden die Wand- und intermolekularen Stöße die Einstellung des Gleichgewichts der Isotope erzwingen, wobei $T_i = T_c$; $v_i = v_c = \omega R$ und $n_i(R) = n_i(R_{in}) \exp [S_{iR}^2 - S_{iRin}^2]$ ($i = 1, h$) gilt.

Die Tracer-MC-Simulation mit der Randbedingung der bewegten Wand eignet sich gut, um die Nichtgleichgewichtseffekte der Isotope mit erträglichem Rechenaufwand aufzuzeigen, da die Stoßberechnung im Simulationsraum entfällt, außerdem erübrigt sich die Bereitstellung von Speicherplatz für die Trägergasmoleküle.

Die aufgrund der geringen Isotopenkonzentrationen stark unterschiedlichen Teilchenzahlen werden durch Wichtungsfaktoren entsprechend den Konzentrationsanteilen im Eintrittszustand ausgeglichen. Die Entmischung von Trägergas und Spurenisotopen bei der Umlenkung durch ortsabhängige Wichtungsfaktoren zu berücksichtigen, ist nach Bird /13/ nicht sinnvoll. Die wesentlichen Nichtgleichgewichte werden in einer wandnahen Schicht erwartet; dies erfordert an der Umlenkungswand ein feiner geteiltes Gitter, um die notwendige Auflösungsgenauigkeit beim Sammeln der makroskopischen Feldgrößen zu erreichen. Das Gitter entsteht durch die Transformation nach Gleichung (2.2)

$$r/a = (r^*/a)^{NG} \quad (2.2)$$

Mit der Gitterkonstanten $NG > 1$ errechnet sich ein feiner geteiltes Gitter im physikalischen Raum in der Radialrichtung r für $r/a \rightarrow 1$, wenn r^* mit gleicher Zellenzahl gleichförmig geteilt wird. Zur korrekten Stoßberechnung darf die Anzahl der Moleküle in einer Zelle nicht kleiner als zwanzig werden, da sonst der Zeitzähler für die Stöße bei zufälliger Wahl eines Stoßpaares mit kleiner Relativgeschwindigkeit unrealistisch groß wird (Bird /11/S.126). Das nahezu konstante Dichteprofil des Trägergases über dem Querschnitt erlaubt aber bei gegebener Ruhedichte und einem Gitter mit hoher Auflösung, wie es für das Sammeln der Feldgrößen gebraucht wird, in den Zellen an der Umlenkungswand nur zu wenig Trägergasmoleküle vorzugeben. Die Unabhängigkeit der Stoß- und Bewegungsberechnung vom Sammeln der Moleküldaten eröffnet die Möglichkeit, in einem Zweigitterverfahren unterschiedliche Zellennetzwerke für beide Vorgänge zu benutzen und die Simulations- und Genauigkeitsbedingungen zu erfüllen.

Die der Trägergasdichte entsprechende Molekülzahl wird der Zelle nur zugeordnet und es entfällt wie beschrieben die Speicherplatzbelegung für das Trägergas. Bei der Auswahl eines Stoßpaares Isotop-Trägergas berechnet sich der Geschwindigkeitsvektor des Trägergasmoleküls aus dem zufällig bestimmten thermischen Geschwin-

digkeitsvektor einer dreidimensionalen Maxwellgeschwindigkeitsverteilung mit Gleichgewichtstemperatur und der in Azimutalrichtung überlagerten örtlichen Strömungsgeschwindigkeit. Nach dem Stoß ändert sich nur der Geschwindigkeitsvektor des Isotopenmoleküls. Das führt zu einem Fehler in der Energie- und Impulsbilanz des Gesamtsystems, der aber bei Spurenkonzentration der Isotope durch den Zufallsprozeß klein gehalten wird. Tracer-Simulationen mit erhöhter Isotopenkonzentration ($\bar{x}_u = 5 \%$) können aus diesem Grund nur Tendenzen aufzeigen.

2.3. Beschreibungsmöglichkeiten der Isotopenentmischung

In Tabelle 2.1. sind für die benutzten Modellbeschreibungen der Isotopentrennung in der Trenndüse die Darstellungsmöglichkeiten der Gradienten des Geschwindigkeits-, Temperatur- und Konzentrationsfeldes sowie der Geschwindigkeitsverteilungsfunktion eingetragen.

Für die in dieser Arbeit vorgestellten MC-Simulationsmethoden besteht danach die Möglichkeit, folgende Effekte zu erfassen:

Vollständige Simulation:

1. Sämtliche Nichtgleichgewichtseffekte einschließlich Abweichungen von der Maxwellverteilung beim Trägergas.
2. Alle Anlaufvorgänge der einzelnen Komponenten, die sich gegenseitig beeinflussen.

Spurengassimulation (Tracer-Simulation):

1. Nichtgleichgewichtseffekte hinsichtlich der Temperatur- und Geschwindigkeitsunterschiede der Isotope untereinander sowie zum festvorgegebenen Trägergas und Abweichungen von den Maxwellverteilungen der Isotope.
2. Einfluß von vorgegebenen Geschwindigkeitsfeldern des Trägergases auf die Trennung.
3. Anlaufvorgänge der Isotope bei gegebenem Geschwindigkeitsfeld.

Die Modellierung als eindimensionale instationäre Simulation ist auf beide Methoden anzuwenden. Die Eintrittsgeschwindigkeit in Hauptströmungsrichtung ist für alle Komponenten identisch und eingefroren. Im Gegensatz zur zweidimensionalen Simulation kann der Trennvorgang ohne Einfluß der Gradienten in Hauptströmungsrichtung untersucht werden.

Die mitbewegte Wand bei der zweidimensionalen Simulation unterdrückt die Gradienten in Hauptströmungsrichtung. In der Zeile "Geschwindigkeitsprofil" steht das Parabelprofil als Beispiel

für ein Geschwindigkeitsprofil mit verschwindender Geschwindigkeit an der Wand. Die systematische Übersicht des erstellten MC-Simulationsprogrammsystems hinsichtlich der Methode und Vorgabe der Anfangs- und Randbedingungen mit den veränderlichen Parametern und ein Programmablaufplan mit der Hierarchie der Zeitschritte bei der MC-Simulation sind im Anhang II gegeben.

Eine Anzahl von Anwendungen einer MC-Simulationsmethode für die Untersuchung der Isotopentrennung mit aerodynamischen Anordnungen ist aus der Literatur bekannt /14,15 ,16 ,17 ,18 ,19 ,20/. Die Standardtrenndüse wurde neben den Arbeiten am Institut des Autors nur noch von Eaton und Fox mit der sogenannten Tracer-Field-Methode untersucht /21/. Bei dieser Methode wird eine kleine Anzahl von Tracer-Molekülen aller drei Komponenten bei der Bewegung durch das Feld und während der Stöße mit den Feldmolekülen der drei Komponenten verfolgt. Nach einem Zeitintervall erfolgt die Korrektur der Geschwindigkeit und Temperatur des Feldes anhand der Daten der Tracer-Moleküle, aber lokal ist immer eine Maxwellgeschwindigkeitsverteilung vorausgesetzt, so daß nicht alle Nichtgleichgewichtseffekte erfaßt werden können. Die Tracer-Field-Methode ist zum Vergleich zusätzlich in Tabelle 2.1. aufgenommen. Sie gleicht bis auf die Darstellungsmöglichkeit der Abweichungen von einer Maxwellverteilung der eindimensionalen vollständigen Simulation. Wegen der Korrektur der Feldgrößen gestaltet sich die Anwendung der Tracer-Field-Methode sehr rechenintensiv.

Der Einfluß, der mit dem Monte Carlo-Verfahren bei der Simulation erfaßten Nichtgleichgewichtseffekte auf die Isotopenentmischung läßt sich am besten herausarbeiten, wenn zum Vergleich Ergebnisse von Kontinuumsberechnungen herangezogen werden, die den Trennvorgang im Rahmen der Chapman-Enskog-Näherung beschreiben. Vergleichbar sind nach Tabelle 2.1. die zweidimensionale Tracer-MC-Simulation mit bewegter Wand und die Kontinuumsrechnung nach Berkahn u.a. /5/. Bei gegebenen Trägergasfeldern und dem gegebenen Geschwindigkeitsprofil in Azimutalrichtung erfaßt die Monte Carlo-Methode über den Diffusionsvorgang der Isotope hinaus deren Gradienten im Temperaturfeld und die Abweichungen

von den Maxwellverteilungen. Die Kontinuumsrechnung nach Becker u.a. /4/ läßt sich nur bedingt als Vergleichsmaßstab zur vollständigen zweidimensionalen MC-Simulation mit ruhender Wand benutzen, da ein fest vorgegebenes Geschwindigkeitsprofil in Azimutalrichtung bei der Kontinuumsrechnung vorausgesetzt wird.

Tabelle 2.1:

Vergleich theoretischer Trenndüsenuntersuchungen

Berechnungsmethode	Monte Carlo Simulation										Kontinuumsrechnung			
	Vollständige Simulation					Tracer Simulation					Tracer-Feld/21/	/4/	/5/	
	zwei		eins			zwei		eins			eins	zwei	zwei	
	zyl	ruhend	bewegt	(kart.)	kart.	bewegt	zyl.	(kart.)	bewegt	eins	kartl.	bewegt	zyl.	zyl.
Komponente	Parabel	c	u	c	u	c	u	Parabel	c	u	c	u	Parabel	Zirkularstr. Rechteck
Geschwindigkeit u Isotopengemisch	$\partial v_{tr}/\partial r$	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b
	$\partial v_{tr}/\partial \phi$	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b
	$\partial v_{\phi}/\partial r$	b	b	w	w	w	w	v	b	w	w	w	v	k(b)
	$\partial v_{\phi}/\partial \phi$	b	b	w	w	w	w	b	b	w	w	w	v	v(b)
Temperaturfeld	$\partial T_{tr}/\partial r$	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b
	$\partial T_{tr}/\partial \phi$	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b
	$\partial T_{\phi}/\partial r$	b	b	w	w	w	w	b	b	w	w	w	b	b
	$\partial T_{\phi}/\partial \phi$	b	b	w	w	w	w	b	b	w	w	w	b	b
Konzentrationsfeld	$\partial n_1/\partial r$	b	b	b	b	b	b	v	b	b	v	b	b	b
	$\partial n_1/\partial \phi$	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b
Geschwindigkeit - keitsverteilung	f_r	b	b	b	b	b	b	b	b	b	a	b	a	a
	f_{ϕ}	b	b	b	b	b	b	b	a	b	a	b	a	a

Symbole: b berechenbar, w berechenbar (jedoch durch bewegte Wand unterdrückt), v variabel vorgebar, k konstant vorgebar, o keine Änderung zulässig, a kleine Abweichung von der Maxwellverteilung anzunehmen.

3. Einfluß der Knudsenzahl auf das Nichtgleichgewicht und die Isotopentrennung für den Grenzfall hoher Machzahl und sehr kleiner Isotopenkonzentrationen

3.1 Geschwindigkeits- und Temperaturfeld

Ausgangspunkt für die Untersuchungen der Strömungsvorgänge bei sehr kleiner Isotopenkonzentration $\tilde{x}_u = 5 \cdot 10^{-2} \%$ ist ein Standardfall mit folgenden Simulationsbedingungen:

Geometrie

Der gekrümmte Kanal der schlitzförmigen Trenndüse nach Abb. 1.1 wird durch einen zweidimensionalen zylindrischen Kanal (Abb. 3.1) mit konstanter Kanalweite a und einem Umlenkwinkel $\phi = 137^\circ$ modelliert. Die Kanallänge ist so gewählt, daß sich für $Kn_c = 0,1$ der Grenzfall der Gleichgewichtslösung zwischen Druck- und Konzentrationsdiffusion einstellt. Das Verhältnis von Kanalweite zu Umlenkradius beträgt $a/(a + R_{in}) = 1/3$. Der Simulationsraum wird in ein Gitter mit 10 variablen Zellenspalten in Radialrichtung und 20 winkelgleichen Zellenzeilen in Azimutalrichtung aufgeteilt. Die Gitterkonstanten der Radialrichtung betragen $NGRID = 4$ für die Stoßberechnung und $NG = 14$ für das Sammeln der Feldgrößen.

Modellgas

Das ternäre Gemisch besteht aus leichtem Trägergas mit der relativen Molekülmasse des Wasserstoffs $\tilde{m}_c = 2$ im großen molaren Überschuß $\tilde{x}_c = 99,95 \%$ und dem Isotopengemisch (schweres Isotop $\tilde{m}_h = 400$, leichtes Isotop $\tilde{m}_l = 300$) mit einem Konzentrationsverhältnis $\tilde{x}_l/\tilde{x}_h = 1$, so daß die mittlere Masse $\tilde{m}_u = 350$ in etwa der mittleren relativen Molekülmasse des UF_6 Isotopengemischs entspricht; damit ergibt sich ein relatives Massenverhältnis von $\tilde{m}_u/\tilde{m}_c = 175$. Die Differenz der relativen Molekülmassen $\Delta\tilde{m} = \tilde{m}_h - \tilde{m}_l$ wird aus Genauigkeitsbetrachtungen bei der Berechnung des Trenneffekts auf $\Delta\tilde{m} = 100$ gespreizt (siehe Pkt. 3.3). Die Betrachtung jeder Gemischkomponente als einatomiges Gas (Verhältnis der spezifischen Wärmen $\gamma = 5/3$) erhöht gegenüber den realen Bedingungen die Schallgeschwindigkeit (z.B. $\gamma_{UF_6} = 1,06/1$) und erhöht bei gleicher gegebener Machzahl das Geschwindigkeitsver-

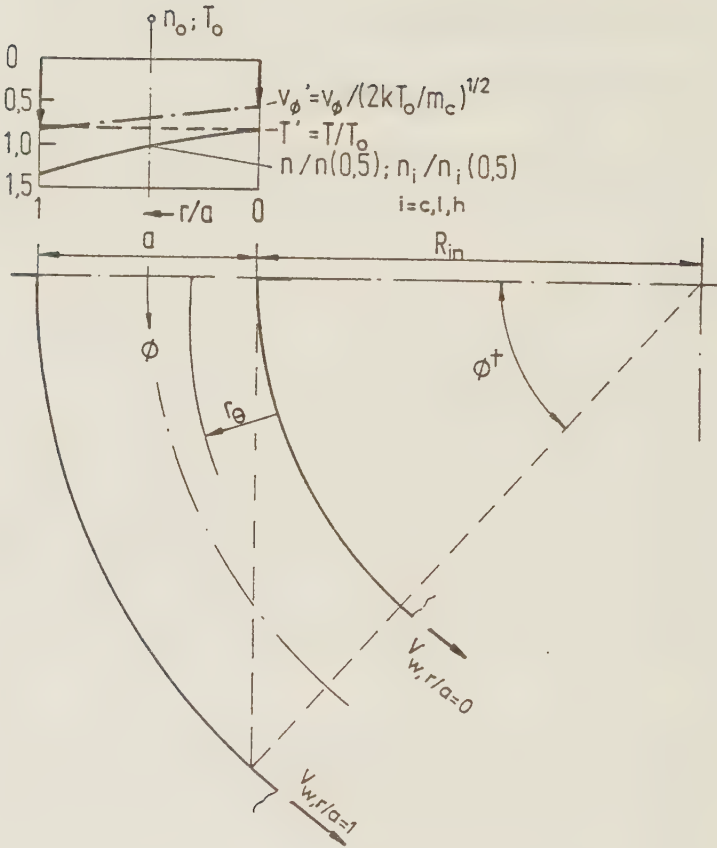


Abb. 3.1. Geometrie des Simulationsraumes und normierte Profile der Azimutalgeschwindigkeit, Temperatur und Teilchendichte am Kanaleintritt. (r_θ Radius der Molstromfläche, ϕ^+ Anlaufwinkel)

(Bedingungen des Standardfalls: $a/(a+R_{in}) = 1/3$, $\phi = 6 \cdot a$, 10×20 Zellen, Gitterteilung: Stoß und Bewegung NGRID = 4, Sammeln der Feldgrößen NG = 14, $\tilde{m}_u/\tilde{m}_c = 175$, $\Delta\tilde{m} = \tilde{m}_h - \tilde{m}_l = 100$, $\tilde{x}_u = 0,0005$, $\tilde{x}_l/\tilde{x}_h = 1$, $M(r/a = 0,5) = 0,9$, $v_\phi = \omega (r+R_{in})$, diffuse Reflexion an bewegter Wand, $T_w/T_o = 0,7874$)

hältnis des Modellgases. Durch die Modellierung der Moleküle als harte Kugeln wird beim Stoß nur Translationsenergie ausgetauscht. Die Verhältnisse der Stoßquerschnitte entsprechen der realen $\text{UF}_6\text{-H}_2$ -Interaktion ($\Omega_{\text{uu}}/\Omega_{\text{cc}} = 6,0$; $\Omega_{\text{cu}}/\Omega_{\text{cc}} = 3,0$.) und geben damit die Transportkoeffizienten richtig wieder.

Eintritts- und Randbedingungen

Das Eintrittsgeschwindigkeitsprofil $v_\theta = \omega(r + R_{\text{in}})$ gilt bei der Tracer-MC-Simulation für das leichte Trägergas im gesamten Simulationsraum. Die Machzahl in der Kanalmitte ($r/a = 0,5$) basierend auf der mittleren Masse des Gemisches $m = \tilde{x}_{\text{c}} m_{\text{c}} + \tilde{x}_{\text{u}} m_{\text{u}}$ ist gleich $M(r/a = 0,5) = 0,9$. Zwischen der Machzahl und dem Geschwindigkeitsverhältnis gilt die Beziehung (3.1) und im thermischen Gleich-

$$S = \sqrt{\frac{\pi}{2}} M \quad (3.1)$$

gewicht gilt zwischen Gemisch und Einzelkomponente i für die Geschwindigkeitsverhältnisse der Zusammenhang

$$S = S_i \sqrt{m/m_i} \quad (3.2)$$

damit berechnet sich das Geschwindigkeitsverhältnis des Isotopen gemisches zu $S_{\text{u}} = 10,4$. Bei diesem Wert des Geschwindigkeitsverhältnisses wird wie in Kapitel 1 gezeigt für eine Zirkularströmung die obere Grenze der Gleichgewichtsentmischung $\varepsilon_{\text{A}}^\infty$ unabhängig vom Geschwindigkeitsverhältnis. Für $S_{\text{u}} \rightarrow \infty$ verschiebt sich die radiale Gleichgewichtslage der Molstromfläche für ein konstantes Abschälverhältnis r_θ^∞ gegen den Umlenkradius, ebenso strebt der Radius der maximalen Isotopentrennung $r_{\theta\text{max}}$ gegen r_θ^∞ . Eine Untersuchung für $\theta_{\text{u}} = 0,25$ zeigt, daß für $S_{\text{u}} = 10$ keine große Änderung der radialen Gleichgewichtslage der Molstromfläche mehr stattfindet, so daß der Maximalwert des Überschwingens $\varepsilon_{\text{Amax}}/\varepsilon_{\text{A}}^\infty$ für eine Zirkularströmung berechnet nach der Chapman-Enskog-Theorie sich nicht mehr wesentlich ändert. Aus diesem Grund wird die hohe Unterschallgemischmachzahl am Eintritt gewählt.

Die über den Querschnitt konstante Eintrittstemperatur des Gemisches, die der Trägergastemperatur im gesamten Simulationsraum entspricht, erhält man aus der isentropen Expansion in der Kanalmitte vom Ruhezustand T_0 auf die Eintrittsmachzahl $M(r/a=0,5)$.

$$T_e = T_0 \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M(r/a=0,5)^2\right)^{-1} \quad (3.3)$$

Sie entspricht auch den Temperaturen der bewegten Wände T_w . Die Eintrittsteilchendichte wird als Gleichgewichtslösung bei konstanter Molenbruchverteilung der Komponenten vorgegeben und errechnet sich bei Normierung auf die Teilchendichte in der Kanalmitte zu

$$\frac{n(r)}{n(r/a=0,5)} = \exp \left\{ \frac{\gamma}{2} M(r/a=0,5)^2 \left[\left(\frac{r+R_{in}}{0,5a+R_{in}} \right)^2 - 1 \right] \right\} \quad (3.4)$$

Die Komponententeilchendichte folgt aus

$$n_i(r) = \tilde{x}_i \cdot n(r)$$

Die normierte Teilchendichte in der Kanalmitte ist

$$\frac{n(r/a=0,5)}{n_0(r/a=0,5)} = \left[1 + \frac{\gamma - 1}{2} M(r/a=0,5)^2 \right]^{-\frac{1}{\gamma - 1}} \quad (3.5)$$

Die Eintrittsknudsenzahl des Trägergases basiert auf der Ruhedichte in der Kanalmitte

$$Kn_c = [\sqrt{2} \Omega_{cc} n_0(r/a=0,5) a]^{-1} \quad (3.6)$$

Um die Ergebnisse in dimensionsloser Form darstellen zu können, wird mit konstanten Größen normiert:

Geometrische Größen mit der Kanalweite; $r' = r/a$ (die Radialkoordinate r' wird gleich null an der Stelle des Radius der Kanalinnenwand R_{in}).

Temperaturen mit der Temperatur der Ruhekammer; $T' = T/T_0$.

Geschwindigkeiten mit der thermischen Geschwindigkeit des Trägergases in der Ruhekammer; $v' = v/(2kT_0/m_c)^{1/2}$.

Zeiten mit dem Quotient aus Kanalweite und thermischer Geschwindigkeit des Trägergases in der Ruhekammer; $t' = t/[a/(2kT_0/m_c)^{1/2}]$.

Dichten auf die Dichte der Ruhekammer; $n' = n/n_0$.

Die Moleküle, die den Simulationsraum entgegen der Hauptströmungsrichtung am Eintrittsquerschnitt verlassen, werden in der gleichen Zellenzeile unter Eintrittsbedingungen wieder eingeführt. Am Kanalende wird jedoch Vakuum angenommen, d.h. austretende Moleküle werden aus dem Simulationsschema entfernt und über den Austrittsquerschnitt gelangen keine Moleküle in den Simulationsraum. Die Rotationsgeschwindigkeit der bewegten Wände ist mit dem Trägergasgeschwindigkeitsprofil konsistent. Die Wandreflexion bei vollständiger Akkomodation erfolgt diffus, dabei wird die Geschwindigkeit zufällig aus einer Maxwellhalbraumverteilung mit Wandtemperatur unter der Bedingung der Erhaltung der Teilchenzahl gewählt.

Die unter den beschriebenen Simulationsbedingungen erzielten Ergebnisse werden im folgenden vorgestellt.

Einen qualitativen Überblick über den Entmischungsvorgang in der Trenndüse gibt die Abbildung 3.2.

Für einen Zeitpunkt nach dem Erreichen des stationären Zustandes der Simulation sind in Augenblicksaufnahmen die Orte der Isotopenmoleküle für die Simulation mit den Knudsenzahlen $Kn_C = 0,1$ (a) und $Kn_C = 0,02$ (b) festgehalten. Bei der größeren Knudsenzahl $Kn_C = 0,1$ entspricht die Strömung nahezu einer freien Molekularströmung. Die Moleküle bewegen sich auf geraden Bahnen in Richtung der Eintrittsgeschwindigkeit in den Kanal, bis sie auf die Umlenkwand treffen und im Mittel in Umfangsrichtung mit der Geschwindigkeit der bewegten Wand reflektiert werden. Wegen der im Vergleich zur Wandgeschwindigkeit kleinen mittleren thermischen Geschwindigkeit bleiben die Moleküle in geringem Abstand zur Umlenkwand konzentriert, der Innenraum ist leer. Für $Kn_C = 0,02$ erfolgt wegen der größeren Anzahl von Stößen mit dem Trägergas eine Anpassung der Isotope an die Trägergasstromlinien und damit eine reduzierte Dichteverteilung an der Umlenkwand.

Ein Maß für die Erwartung, daß nach einem Stoß zweier Moleküle eine große Komponente des Geschwindigkeitsvektors in der ursprünglichen Richtung vor dem Stoß erhalten bleibt, bildet die Persistenz (Jeans /22/S. 263). Die große Persistenz des Isotopengemischs für $Kn_C = 0,1$ zeigt sich in Abbildung 3.3. In der Zellenmitte ist als

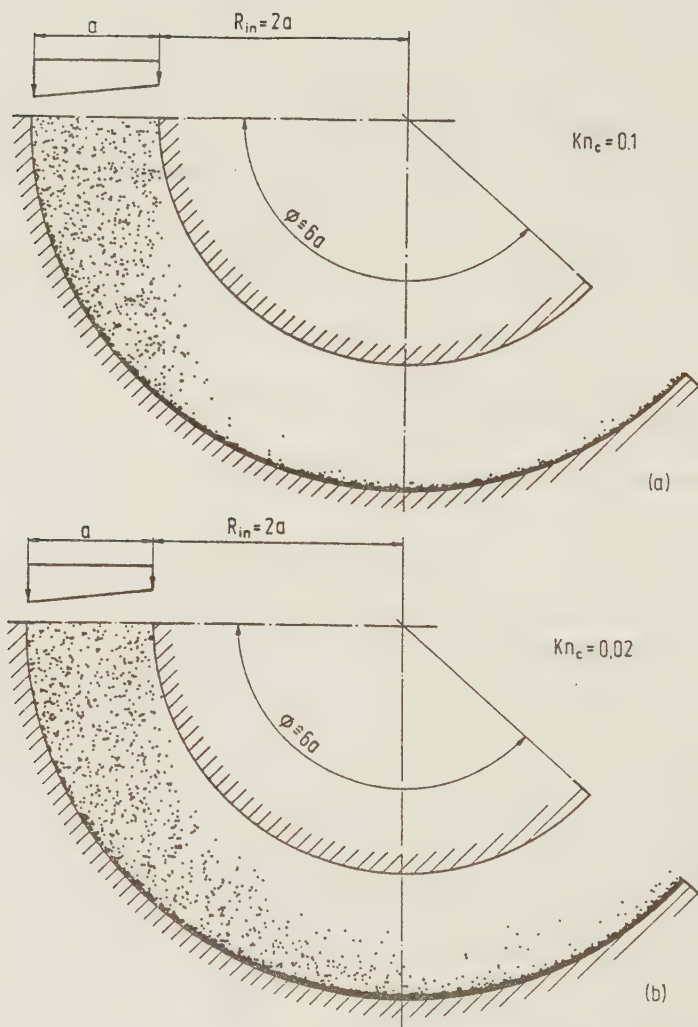


Abb. 3.2. Augenblicksaufnahme der Verteilung von Isotopenmolekülen im Simulationsraum für verschiedene Knudsenzahlen $Kn_c = 0,1$ (a) und $Kn_c = 0,02$ (b).
(Standardfall)

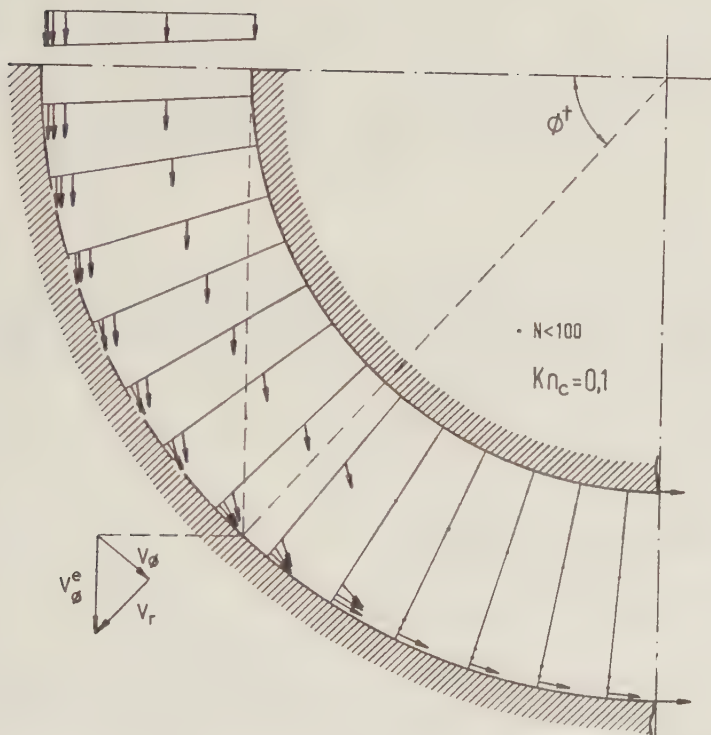


Abb. 3.3. Anpassung der Geschwindigkeitsvektoren des Isotopen-
gemisches an die Krümmung der Umlenkwand und des Trägergasgeschwin-
digkeitsfeldes für $Kn_C = 0,1$ und Zerlegung des Geschwindigkeitsvek-
tors am Anlaufwinkel $\phi^\dagger$ in maximale Radial- und minimale Azimutal-
geschwindigkeit bei freier Molekularströmung. Punkte ohne Pfeil
kennzeichnen Zellenmittelpunkte mit einer Probengröße kleiner ein-
hundert.

(Standardfall)

repräsentativer Mittelwert für den Zellenbereich der Geschwindigkeitsvektor des Isotopengemisches $\vec{v}_u$ eingetragen. Der Anlaufwinkel $\phi^\dagger$ bezeichnet den Ort, an dem bei verschwindender thermischer Geschwindigkeit ($S_u \gg 1$) für freie Molekularströmung alle Moleküle mindestens einen Wandstoß erfahren haben. Der Anlaufwinkel hängt vom Verhältnis Kanalweite zu Umlenkradius ab:

$$\phi^\dagger = \arccos [1 - a/(a + R_{in})] \quad (3.7)$$

Für den Grenzfall der freien Molekularströmung lassen sich durch einfache geometrische Zerlegung des Eintrittsgeschwindigkeitsvektors $v_\phi^e = \omega \cdot R_{in}$ an der Stelle $r^i = 1$ und $\phi = \phi^\dagger$ die größten bzw. kleinsten zu erwartenden Geschwindigkeitskomponenten (ohne die überlagerte thermische Geschwindigkeit jeder Richtung) in radialer Richtung $v_{rmax,lim}$ und azimuthaler Richtung $v_{\phi min,lim}$ nach Gleichung (3.8) berechnen

$$v_{rmax,lim} = \omega \cdot R_{in} \sin \phi^\dagger \quad (3.8a)$$

$$v_{\phi min,lim} = \omega \cdot R_{in} \cos \phi^\dagger \quad (3.8b)$$

Im Anlaufbereich $\phi < \phi^\dagger$ erfahren die Geschwindigkeitsvektoren eine große Richtungsänderung an der Umlenkwand, erst für $\phi > \phi^\dagger$ folgen die Vektoren in der Kanalmitte mit ihrer Richtung der Stromlinienkrümmung des leichten Trägergases.

Aus den berechneten Feldern der Radial- und Azimutalgeschwindigkeit und der Temperatur für die Isotope lassen sich mittels Schnitten Profile z.B. bei konstantem Umlenkwinkel gewinnen.

Jede Geschwindigkeit im Gitterpunkt des Simulationsraumes repräsentiert den Mittelwert der Radial- oder Azimutalgeschwindigkeit der über den Simulationszeitraum gesammelten Einzelgeschwindigkeiten der N_{ip} Moleküle (Probengröße)

$$\bar{v}_{iqp} = \frac{\sum v_{iqp}}{N_{ip}} \quad (3.9)$$

dabei bedeutet i die Komponente u, l oder h; q bezeichnet die Richtung r, ϕ oder z und p die Zellennummer im Simulationsraum. Die Temperatur im Gitterpunkt ist durch (3.10) gegeben.

$$T_{iqp} = \frac{m_i}{k} [\overline{v_{iqp}^2} - \bar{v}_{iqp}^2] \quad (3.10)$$

Der verwendete Temperaturbegriff spiegelt die Translationsenergie der Moleküle wider und gilt somit auch in den getrennten Koordinatenrichtungen.

Da das Trägergasfeld fest vorgegeben ist und die Radialkomponente der Trägergasgeschwindigkeit im Gleichgewicht verschwindet, stellt die Radialkomponente der Isotopengeschwindigkeit die Diffusionsgeschwindigkeit der Isotope zur Umlenk wand bezüglich des Trägergases dar. Abb. 3.4 zeigt radiale Geschwindigkeitsprofile der beiden Isotope am Anlaufwinkel $\phi \sim \phi^+$ für zwei Knudsenzahlen. Wegen der größeren Masse diffundiert das schwere Isotop ($h \hat{=}$ ausgefüllten Symbolen) schneller durch das Trägergas als das leichte Isotop. Eine größere Anzahl von Stößen mit dem Trägergas ($Kn_c = 0,02$) verringert die Diffusionsgeschwindigkeit. An der Umlenk wand verschwindet die Diffusionsgeschwindigkeit. Für Radien $r/a < 0,9$ findet eine Strömungsbeeinflussung durch an der Umlenk wand reflektierte Moleküle nicht statt, die Temperatur der Isotope entspricht der Eintrittstemperatur bzw. der Trägergastemperatur (Abb. 3.6). Bildet man die auf die Isotopengemischgeschwindigkeit bezogene Differenz der Diffusionsgeschwindigkeiten der Isotope, im Profilschnitt bei $\phi \sim \phi^+$, so steigt das Verhältnis vom Innenradius ausgehend im Bereich dicht an der Umlenk wand steil an.

Die Ursache bildet die schneller als der Schlupf zwischen den Isotopen abnehmende Diffusionsgeschwindigkeit des Isotopengemisches. Da das schwere Isotop wegen der abgeschlossenen Diffusion

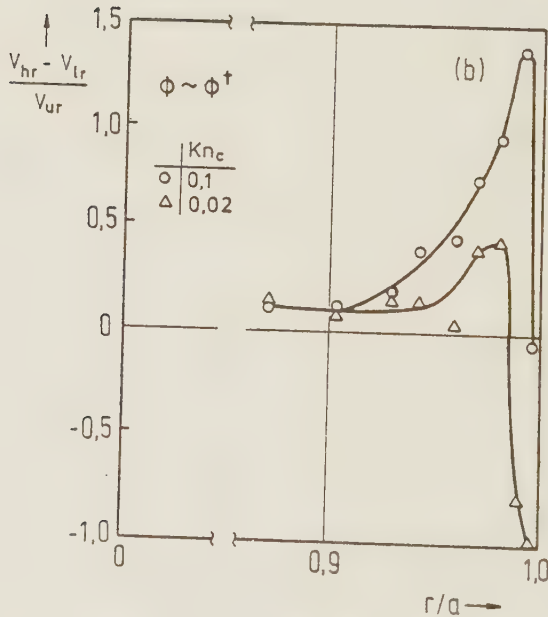
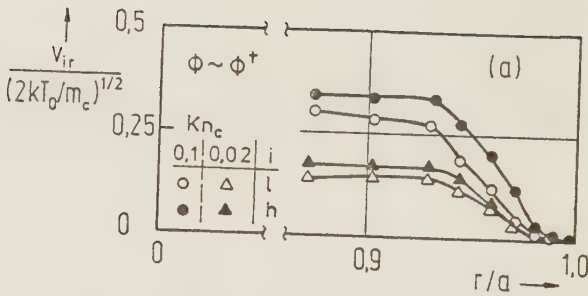


Abb. 3.4. (a) Berechnete Profile der Diffusionsgeschwindigkeit der Isotope normal zur Umlenkwand v_{ir} am Anlaufwinkel ϕ^+ für zwei Knudsenzahlen. (b) Relativer Schlupf der Diffusionsgeschwindigkeiten der Isotope $v_{hr} - v_{lr}$ bezogen auf die Diffusionsgeschwindigkeit des Isotopengemisches v_{ur} am Anlaufwinkel ϕ^+ für zwei Knudsenzahlen. (Standardfall)

eher zur Ruhe kommt als das leichte Isotop, kehrt sich das Vorzeichen der Differenz ($v_{hr} - v_{lr}$) um. Der Diffusionsprozeß ist an dem Umlenkwinkel $\phi \sim \phi^\dagger$ in der Nähe der Umlenk wand schon mit einer Rückvermischung verbunden.

Die Änderung der Geschwindigkeit des Isotopengemisches und der einzelnen Isotope am Anlaufwinkel $\phi^\dagger$ bei Variation der Knudsenzahl von $Kn_C = 0,02$ bis $Kn_C \rightarrow \infty$, das heißt für freie Molekularströmung, zeigt Abb. 3.5a. Bei freier Molekularströmung ohne Wandeinfluß und ohne äußere Kraft, wie sie im Bereich $r/a < 0,90$ der zylindrischen Trenndüse vorliegt, gibt es keine Trennung der Isotope, da die räumliche Verteilung der Moleküle unabhängig von der Molekülmasse ist. Die radiale Geschwindigkeit des Isotopengemisches und die Geschwindigkeiten des leichten und schweren Isotops sind identisch und entsprechen dem Wert der radialen Komponente der Vektorzerlegung des Eintrittsvektors am Umlenkwinkel $\phi \sim \phi^\dagger$ nach Gleichung (3.8a). Der Geschwindigkeitsunterschied zwischen den Isotopen $v_{hr} - v_{lr}$ durchläuft zwischen den Grenzwerten der Kontinuumsströmung und freien Molekularströmung bei $Kn_C = 0,1$ ein Maximum (Abb. 3.5b). Entscheidend für die Trennung der Isotope ist jedoch nach Berkhahn /23/S. 7 Gl. (2.3) die relative auf die Isotopengemischgeschwindigkeit bezogene Geschwindigkeitsdifferenz, sie steigt selbst für $Kn_C = 0,02$ noch an, da die Isotopengemischgeschwindigkeit schneller abnimmt als der Schlupf zwischen den Isotopen. Die maximale Machzahl der radialen Isotopendiffusion im Bereich $r/a < 0,90$ ($T_{ur} = T_c$, Abb. 3.6)

$$M_{ur\max} = \frac{v_{ur\max, \lim}}{\sqrt{\frac{\gamma k T_{ur}}{m_u}}} \quad (3.11)$$

erreicht mit $M_{ur} = 7,15$ die Machzahl des Isotopengemisches am Eintritt ($\phi=0^\circ$; $r/a \stackrel{\text{max}}{=} 0,5$) $M_u = 11,41$. Das Verhältnis der Diffusionsgeschwindigkeit der gesamten Isotope zur Strömungsgeschwindigkeit des Gemisches ist nicht mehr klein.

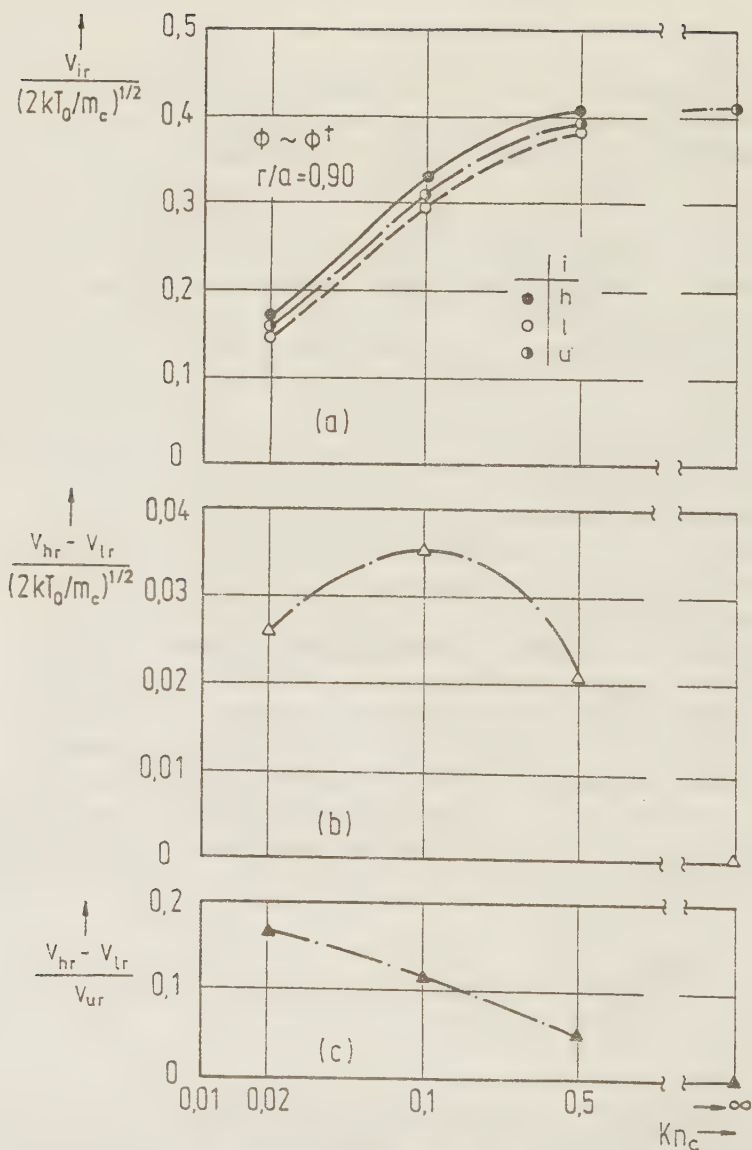


Abb. 3.5. (a) Maximale radiale Diffusionsgeschwindigkeiten der Isotope und des Isotopengemisches in Abhängigkeit von der Knudsenzahl im Bereich ohne Wandeinfluß ($r/a = 0,90$) am Anlaufwinkel $\phi^\dagger$. (b) Geschwindigkeitsschlupf zwischen dem schweren und leichten Isotop in Richtung normal zur Wand für veränderliche Knudsenzahlen. (c) Relative Differenz der Isotopendiffusionsgeschwindigkeiten $(v_{hr} - v_{lr})/v_{ur}$ in Abhängigkeit von der Knudsenzahl. (Standardfall)

Das radiale Temperaturprofil in der Nähe des Anlaufwinkels $\phi^\dagger$ weist im von den Wandreflexionen beeinflussten Gebiet einen beträchtlichen Anstieg der Isotopentemperaturen über die Gleichgewichtstemperatur aus. Selbst für $\text{Kn}_c = 0,02$ beträgt dieser Anstieg für das leichte Isotop noch das Dreifache und für das schwere Isotop das Viereinhalbfache der Gleichgewichtstemperatur, die der festgehaltenen Trägergastemperatur und der Wandtemperatur entspricht (Abb. 3.6). Im Simulationsraum, der nicht von den Wandstößen beeinflusst wird ($r/a < 0,9$), herrscht Gleichgewichtstemperatur, und die Geschwindigkeitsverteilungsfunktion der Isotope entspricht angenähert einer Maxwellverteilung. Die radiale Lage des Temperaturmaximums verschiebt sich für das leichtere Isotop zu kleineren Radien, weil die thermische Geschwindigkeit der von der Umlenkwand reflektierten Moleküle¹ entsprechend der reziproken Wurzel aus der Masse größer wird, und somit über alle Moleküle gesehen die Auswirkungen der Stöße mit der Umlenkwand weiter in die Kanalmitte getragen werden. Daß der Temperaturanstieg des leichten Isotops weniger ausgeprägt wird als der des schweren Isotops, läßt sich an Gleichung (3.10) anschaulich deuten. Da die Temperatur ein Maß für die kinetische Energie der in der betrachteten Zelle gesammelten Daten der Moleküle eines Isotops im Simulationszeitraum darstellt, wird zur Berechnung die Summe der Geschwindigkeitsquadrate der N_{ip} Moleküle gebildet

$$\overline{v_{iqp}^2} = \frac{\sum (v_{iqp}^- \cdot v_{iqp}^+)}{N_{ip}} \quad (3.12)$$

Die mittlere negative Geschwindigkeit aller reflektierten Moleküle ist kleiner als die mittlere positive Geschwindigkeit der zur Umlenkwand fliegenden Moleküle eines Isotops. Faßt man nun die mittleren Geschwindigkeiten $\bar{v}_{irp}^-$ und $\bar{v}_{irp}^+$ als zwei repräsentative Einzelgeschwindigkeiten v_{iqp} auf und wendet Gleichung

¹Die Radialgeschwindigkeit des reflektierten Moleküls besteht nur aus einer der Wandtemperatur entsprechenden thermischen Geschwindigkeit, da die Umlenkwand in Radialrichtung nicht bewegt wird.

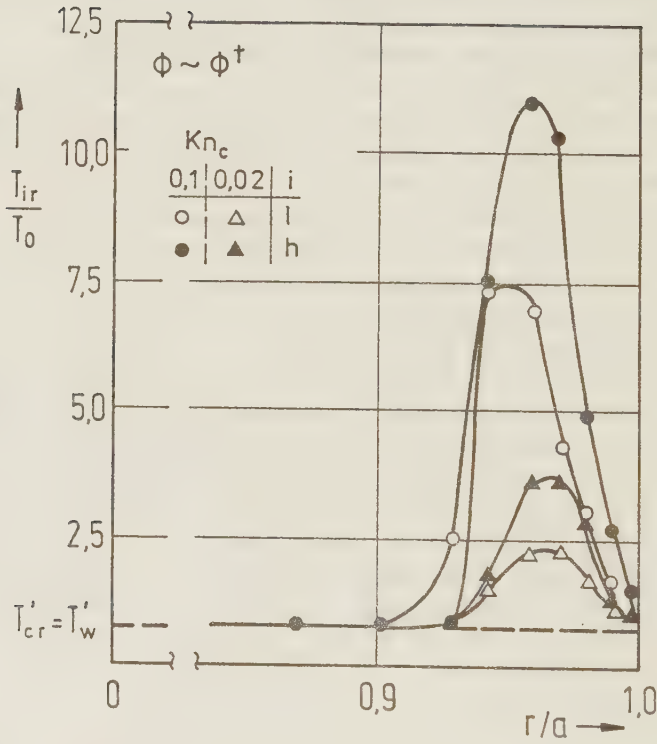


Abb. 3.6. Berechnete Profile der radialen Komponente der Isotopentemperaturen am Anlaufwinkel $\phi^\dagger$ nahe der Umlenk wand für zwei Knudsenzahlen.
(Standardfall)

(3.12) an, so liegt das Produkt $\bar{v}_{irp}^- \cdot \bar{v}_{irp}^-$ für das leichte Isotop näher am Produkt $\bar{v}_{irp}^+ \cdot \bar{v}_{irp}^+$, da die mittlere thermische Geschwindigkeit $\bar{v}_{lrp}$ größer als $\bar{v}_{hrp}$ ist.

Das wird besonders für freie Molekularströmung ($Kn_C \rightarrow \infty$) deutlich. In diesem Fall entspricht $\bar{v}_{hrp}^+$ gleich $\bar{v}_{lrp}^+$ der Moleküle ohne Wandstoß und der Temperaturunterschied zwischen den Isotopen für den Radius $r/a = 0,958$ wird maximal (Abb. 3.7a). Mit abnehmender Knudsenzahl besteht die Möglichkeit, die Energie durch Stöße in jeweils drei Koordinatenrichtungen des Moleküls und über das Trägergas zu verteilen. Trotzdem übersteigt selbst für $Kn_C = 0,02$ die Temperatur des Isotopengemisches in Radialrichtung die Gleichgewichtstemperatur um den Faktor dreieinhalb. Der Schlupf zwischen den Isotopen verringert sich in gleicher Weise wie die Abnahme der absoluten Isotopentemperaturen (Abb. 3.7b) mit der Verringerung der Knudsenzahl. Da die Gradienten $\partial T_{ur}/\partial Kn_C$ und $\partial (T_h - T_l)_r/\partial Kn_C$ von gleicher Größenordnung sind, bleibt die relative Temperaturdifferenz bezogen auf die Isotopengemischtemperatur in Radialrichtung über den gezeigten Knudsenzahlbereich ($0,02 \leq Kn_C \rightarrow \infty$) nahezu erhalten (Abb. 3.7c).

Ein Profilschnitt für konstanten Radius $r/a = 0,958$ längs des Umlenk winkels ϕ im Simulationsraum (Abb. 3.8) erläutert die Verschiebung des maximalen, radialen Temperaturnichtgleichgewichts zu größeren Umlenk winkeln mit fallender Knudsenzahl. Dabei ergibt sich für $Kn_C = 0,5$ schon nahezu das Verhalten bei freier Molekularströmung (siehe auch Abb. 3.5 und Abb. 3.7) und der Maximalwert befindet sich am Anlaufwinkel ϕ^+ ; für $Kn_C = 0,1$ verschiebt sich das Maximum zu $\phi = 52^\circ$ und für $Kn_C = 0,02$ zu $\phi = 65^\circ$. Die Lage des maximalen Temperaturnichtgleichgewichts zwischen leichtem und schwerem Isotop unterscheidet sich nur geringfügig.¹

¹Wegen der Zelleneinteilung des Simulationsraumes stellen die glatten Kurven eine Integration über die Stufenkurven mit dem repräsentativen Mittelwert in der Zellenmitte, die mit der MC-Simulation berechnet werden, dar; das begrenzt die Auflösungsmöglichkeit der Berechnung.

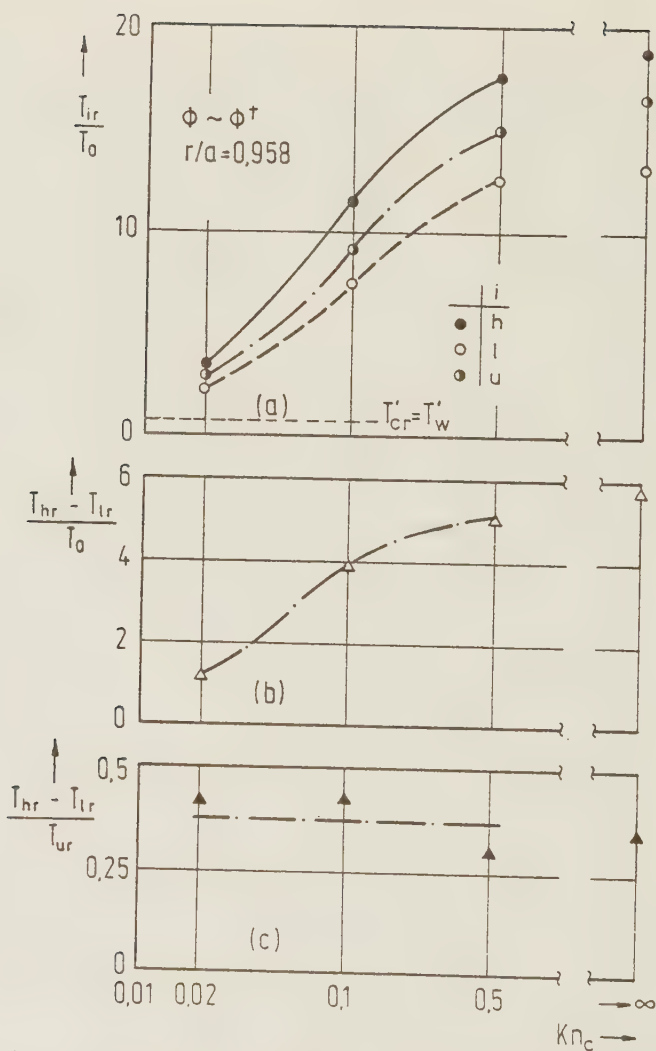


Abb. 3.7. (a) Maximales radiales Temperaturnichtgleichgewicht zwischen der Isotopengemischtemperatur T_{ur} und der Trägergasttemperatur T_c in Abhängigkeit von der Knudsenzahl zwischen den Grenzen der freien Molekularströmung ($Kn_c \rightarrow \infty$) und der Strömung im Übergangsgebiet ($Kn_c = 0,02$). (b) Temperaturnichtgleichgewicht in Radialrichtung zwischen den Isotopen $T_{hr} - T_{lr}$ mit veränderlicher Knudsenzahl. (c) Abhängigkeit des relativen, auf die Isotopengemischtemperatur bezogenen, Temperaturnichtgleichgewichts zwischen den Isotopen von der Knudsenzahl. (Standardfall)

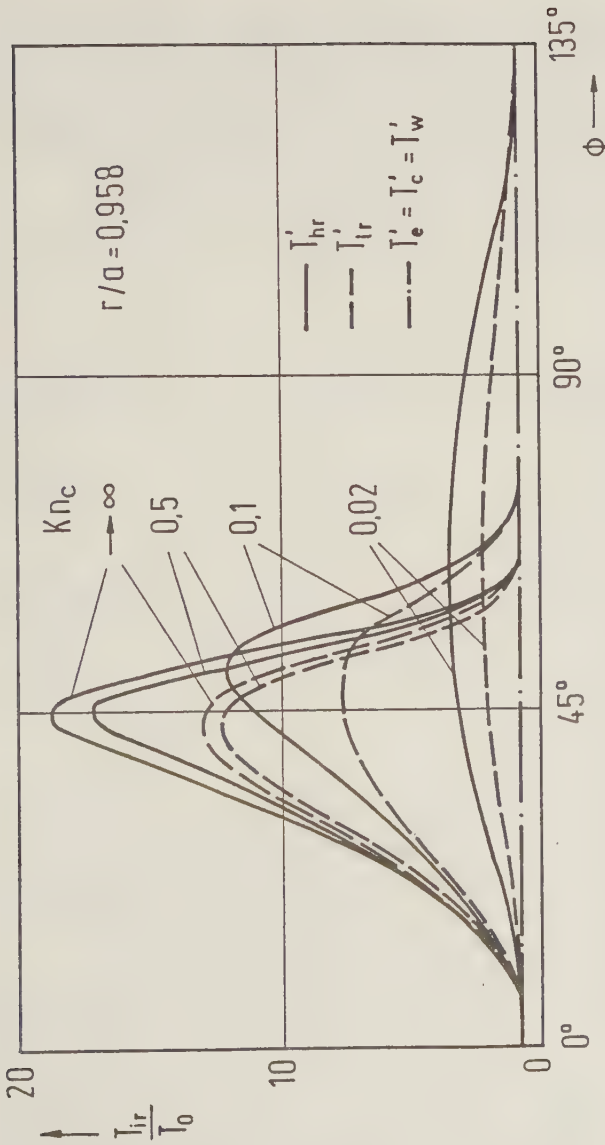


Abb. 3.8. Entwicklung der radialen Temperatur des schweren (T'_{hr}) und leichten (T'_{lr}) Isotops mit zunehmendem Umlenkwinkel ϕ bei konstantem Radius $r/a = 0,958$ als Funktion der Knudsenzahl. (Standardfall)

Eine steigende Zahl von Stößen zwischen Isotopengemisch und leichtem Trägergas bewirkt eine Anpassung der Isotopengemischstromlinien an die Trägergasstromlinien (siehe auch Abb. 3.2). Qualitativ bleiben die berechneten maximalen Schlupfeffekte der Isotope untereinander und zwischen Isotopengemisch und Trägergas als Funktion der Knudsenzahl, wie in Abb. 3.7 für den Umlenkwinkel ϕ^+ gezeigt, für die Maximalwerte des gesamten Simulationsraumes ähnlich, sie treten nur für kleine Knudsenzahlen bei größerem Umlenkwinkel auf.

Die großen Temperaturgradienten bei den Berechnungen mit dem Modellgas erfordern eine Untersuchung des Einflusses der Thermodiffusion auf den Diffusionsvorgang der Isotope in der Trenndüse. Nach einer Arbeit von Kirch und Schütte /24/ liegt der gemessene Thermodiffusionsfaktor α_T des binären Isotopengemisches $U^{235}F_6$ und $U^{238}F_6$ im Temperaturbereich von 300 K bis 500 K in der Größenordnung von 10^{-5} , so daß für die Massendifferenz zwischen den Isotopen $\Delta \tilde{m} = 3$ selbst bei den großen mit der MC-Simulation berechneten Temperaturgradienten kein Einfluß der Thermodiffusion auf die Trennung der Isotopen zu erwarten ist. Nach der Theorie (Chapman und Cowling /25/S. 168) und Messungen von Deb und Barua /26/ am ternären System He-Ne-Kr zeigt sich kein Einfluß eines leichten Trärgases auf den Thermodiffusionsfaktor $\alpha_T^{bin} \sim \alpha_T^{tern}$ der schweren Komponenten.¹

Betrachtet man die Thermodiffusion zwischen den Isotopen unabhängig von der Anwesenheit des leichten Trärgases $\alpha_{Th1}^{bin} = \alpha_{Th1}^{tern}$ (für die weitere Betrachtung entfällt die Unterscheidung zwischen binärem und ternärem Gemisch), so läßt sich der Thermodiffusionsfaktor berechnen, indem man ihn in das Produkt eines Thermodiffusionsfaktors für starr elastische Kugeln und eine Härtefunktion zerlegt.

$$\alpha_T = \alpha_{sek} \cdot R_T \quad (3.13)$$

Die Härtefunktion R_T ist immer kleiner als eins und beschreibt den Temperatureinfluß auf die Wechselwirkung der stoßenden Moleküle. Bei hohen Temperaturen, wo der harte Atomkern für die Wechselwirkung bestimmend wird, gelangt R_T in die Größenordnung eins (Schütte /27/S. 641). Der Thermodiffusionsfaktor für starr elastische Kugeln ist nur von den relativen Molekülmassen ($\tilde{m}_h = 400$; $\tilde{m}_l = 300$), Moleküldurchmessern der Isotope (hier $d_h/d_l = 1$) und der Konzentrationsverteilung (hier $\tilde{x}_h/\tilde{x}_l = 1$) abhängig und kann nach Schütte /27/ für das Modellgas der MC-Simulation zu $\alpha_{sek\ h1} = +0,1254$ be-

¹Die schweren Komponenten stellen mit Ne = 60 % und Kr = 25 % in /26/ keinen Spurenanteil des Gasgemisches dar.

rechnet werden. Das positive Vorzeichen bedeutet, daß die schwere Komponente sich im Bereich tieferer Temperatur anreichert. Da für $Kn_c = 0,1$ das maximale Temperaturverhältnis $T_{ur}/T_o = 9,7$ bei der MC-Simulation erreicht wird, liegt R_T in der Größenordnung eins und es folgt $\alpha_{Th1} = \alpha_{sek\ h1}$.

Anhand der binären Diffusionsgleichung ohne Beschleunigungsterm im Rahmen der hydrodynamischen Näherung (Waldmann /28/ S. 413)

$$(v_h - v_l)_r = - \frac{1}{\bar{x}_h \bar{x}_l} D \left[\frac{\partial \bar{x}_h}{\partial r} + \frac{m_l - m_h}{m_u} \bar{x}_h \bar{x}_l \frac{\partial p}{p \partial r} + \alpha_{Th1} \bar{x}_h \bar{x}_l \frac{\partial T_u}{\partial r} \right] \quad (3.14)$$

wird der Einfluß der Thermodiffusion im Vergleich zur Druckdiffusion und der entgegengerichteten ausgleichenden Konzentrationsdiffusion sichtbar gemacht. Dabei muß der Simulationsraum in zwei Bereiche eingeteilt werden, in denen der Gradient der Isotopengemischtemperatur¹ ein entgegengesetztes Vorzeichen aufweist. Zum Beispiel müßte im Bereich $\partial T_u / \partial r > 0$ das schwere Isotop auf Grund der Thermodiffusion zur Innenwand und im Bereich $\partial T_u / \partial r < 0$ zur Umlenk wand diffundieren. Die Thermodiffusion unterstützt die Druckdiffusion und damit die Isotopentrennung im Bereich zwischen maximalem Temperaturnichtgleichgewicht und Umlenk wand, während sie in der anderen Richtung die die Trennung vermindernde Konzentrationsdiffusion verstärkt. Am Umlenk Winkel mit dem größten Temperaturnichtgleichgewicht zwischen dem Trägergas und dem Isotopengemisch, also im Bereich der größten radialen Temperaturgradienten, ergeben sich folgende Größenordnungen: Im Gebiet, wo Konzentrationsdiffusion und Thermodiffusion gemeinsam gegen die Druckdiffusion wirken, läßt sich die Thermodiffusion um eine Zehnerpotenz größer abschätzen als die Konzentrationsdiffusion, diese ist jedoch um zwei Größenordnungen

¹ Zur Vereinfachung wird für die beiden Isotope, die wie in Kapitel 3.1. gezeigt, unterschiedliche Temperaturen mit Maxima an verschiedenen Orten aufweisen, das Feld der Isotopengemischtemperatur zugrundegelegt.

kleiner als die entmischende Druckdiffusion. An der Umlenk wand, wo die Thermodiffusion die Druckdiffusion verstärkt, sind die Gradienten der Temperatur und der Konzentration wesentlich steiler, beide Diffusionsterme der Thermo- und der Konzentrationsdiffusion sind von gleicher Größenordnung und der Druckdiffusionsterm ist nur um eine Zehnerpotenz größer, so daß für die Modellrechnungen mit der Differenz der relativen Molekülmassen $\Delta \tilde{m} = 100$ der Einfluß der Thermodiffusion zwischen den beiden Isotopen die Trennung beeinflußt. Das gilt sowohl für $Kn_c = 0,1$ als auch für $Kn_c = 0,02$. Dieser Effekt ist für das reale Verfahrensgas wegen der geringen Massendifferenz nicht zu erwarten. Welche Rolle das Trägergas im Rahmen der Thermodiffusion bei der Isotopentrennung spielt, kann nicht abgeschätzt werden, da die angeführten theoretischen Überlegungen nur in Gasen mit lokal einheitlicher Temperatur gelten.¹

Eine Molstromfläche für konstantes Isotopengemischabschälverhältnis verschiebt sich mit zunehmender Umlenkung in die Nähe der Umlenk wand bis zur Gleichgewichtslage. Für den örtlichen Trenneffektverlauf bei konstantem Abschälverhältnis spielt die azimutale und radiale Lage der Molstromfläche und dazugehörig die Lage des maximalen Temperaturnichtgleichgewichts eine Rolle, ob die Trennung zwischen den Isotopen durch Thermodiffusion erniedrigt oder erhöht wird. Grundsätzlich kann für kleine Umlenkwinkel ($\phi < 30^\circ$) und Tracer-Simulation bei einem Abschälverhältnis von $\theta_u = 0,25$ mit einer Reduzierung der Isotopentrennung gerechnet werden. Da der Trenneffekt einen Integralwert über den Radius bei konstantem Umlenkwinkel darstellt, wird die unterstützende Wirkung der Thermodiffusion bei der Isotopentrennung bei großen Radien erst wirksam, wenn der hemmende Anteil durch Integration über einen Teil des unterstützenden Anteils ausgeglichen ist, d.h. der Radius der Molstromfläche, auf

¹Die von Hamel /29/ abgeleiteten Zwei-Fluid hydrodynamischen Gleichungen, die ein binäres Gemisch mit Komponenten unterschiedlicher Masse und Temperatur beschreiben, sind nicht anwendbar, da für die Komponenten, z.B. für das Trägergas und das Isotopengemisch, angenäherte Maxwellverteilungen vorausgesetzt sind und die schwere Komponente nicht in Spurenkonzentration vorliegen soll.

der die unterstützende Wirkung der Thermodiffusion eintritt, liegt noch dichter an der Umlenkwand als der Radius des maximalen Temperaturungleichgewichts der Isotope.

Faßt man die Geschwindigkeit und Temperatur einer Komponente im Geschwindigkeitsverhältnis zusammen, so folgt für das leichte Trägergas in radialer Richtung wegen des festgehaltenen Strömungsfeldes $S_{cr} = 0$. Den Schlupf der Isotope gegenüber dem Trägergas und der Isotope untereinander zeigt Abb. 3.9 am Anlaufwinkel $\phi \sim \phi^\dagger$ für zwei Knudsenzahlen. Im thermodynamischen Gleichgewicht gilt wegen der größeren Masse des schweren Isotops: S_h wird um den Faktor $\sqrt{m_h/m_l}$ größer als S_l . Die gestrichelten Linien in Abb. 3.9 machen deutlich, daß bis auf den Wandbereich der Schlupf zwischen den Isotopen darüber liegt. Molekularsondenmessungen (Bier /7/, Ehrfeld W. /6/, Ehrfeld U. /8/) erlauben es nicht zu unterscheiden, ob der Schlupf zwischen den Geschwindigkeitsverhältnissen einer schweren Komponente S_h und dem einer leichten Komponente multipliziert mit der Wurzel aus dem Verhältnis der Massen $S_l/\sqrt{m_h/m_l}$ seine Ursache in einem Temperatur- oder Geschwindigkeitsunterschied der Komponenten hat (Ehrfeld /6/S. 55).

Aus den vorangegangenen Betrachtungen zum Geschwindigkeitsverlauf der Isotope lassen sich für das radiale Geschwindigkeitsverhältnisprofil zwei Bereiche mit dem Grenzradius $r/a \sim 0,9$ einteilen. Von $r/a = 0,9$ in Richtung $r/a = 1,0$ setzt sich das Nichtgleichgewicht im Geschwindigkeitsverhältnis aus Geschwindigkeits- und Temperaturnichtgleichgewicht zusammen. Das ausgeprägte Maximum im Temperaturnichtgleichgewicht (Abb. 3.6) verringert das Geschwindigkeitsverhältnis stark, so daß die konvexe Krümmung (von $S_{cr} = 0$ aus betrachtet) des Profils in Wandnähe in eine konkave Krümmung übergeht. Für Werte $r/a < 0,9$ besteht das Ungleichgewicht im Geschwindigkeitsverhältnis wegen des Gleichgewichts in den Temperaturen der Gemischkomponenten nur im Schlupf zwischen den Geschwindigkeiten der Isotope, die durch den Diffusionsvorgang der Isotope im Trägergas bestimmt sind. Die Abhängigkeit der Nichtgleichgewichte der Geschwindigkeitsverhältnisse $S_{hr} - S_{lr} \sqrt{m_h/m_l}$ für den Radius $r/a = 0,9$ am Anlaufwinkel $\phi^\dagger$ von der Knudsenzahl entspricht der Geschwindigkeitsdifferenz der Isotope $v_{hr} - v_{lr}$ in Abb. 3.5a und verschwindet für Kn_c gegen unendlich (Abb. 3.10).

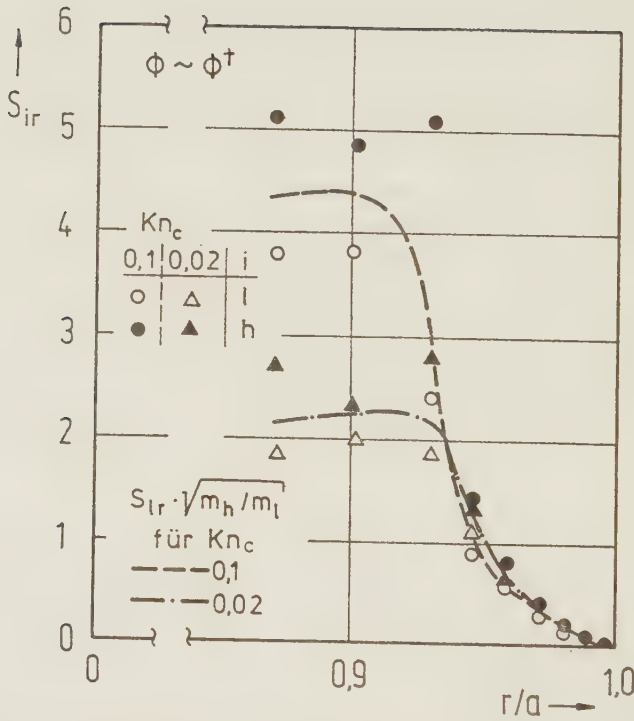


Abb. 3.9. Isotopengeschwindigkeitsverhältnisse in Radialrichtung am Anlaufwinkel $\phi^\dagger$ für zwei Knudsenzahlen. Differenz über die Gleichgewichtsströmung $S_{hr} = S_{lr} \sqrt{m_h/m_l}$ (--- und ----) zwischen schwerem und leichtem Isotop hinaus. (Standardfall)

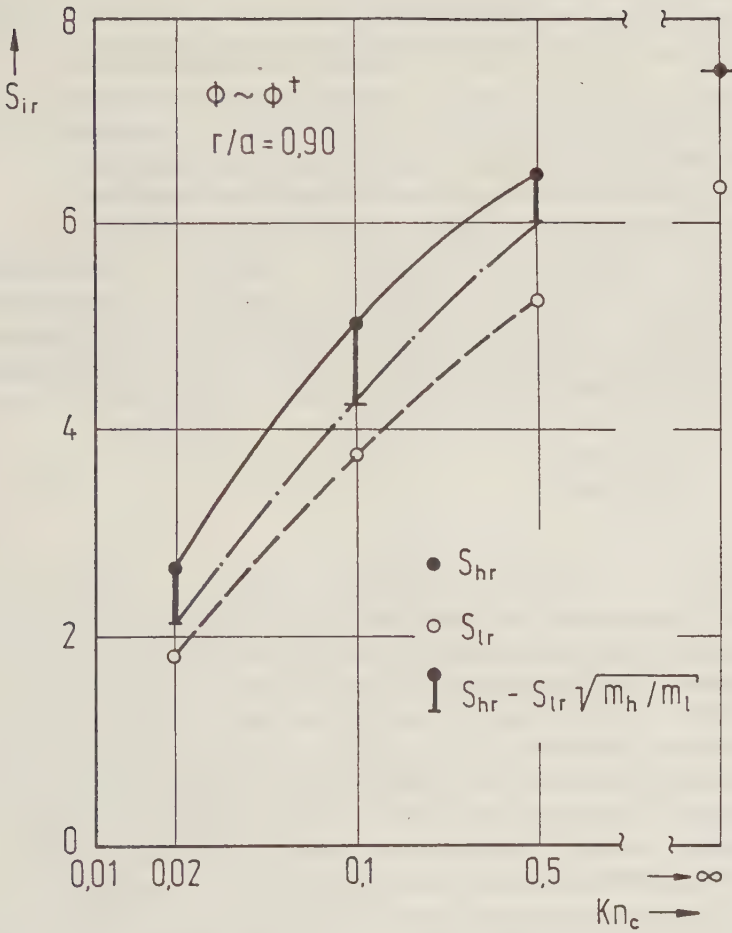


Abb. 3.10. Entwicklung des Nichtgleichgewichtes der Geschwindigkeitsverhältnisse in Radialrichtung des schweren und leichten Isotops $S_{hr} - S_{lr} \sqrt{m_h/m_l}$ am Anlaufwinkel ϕ^+ für konstanten Radius $r/a = 0,9$ in Abhängigkeit von der Knudsenzahl.
(Standardfall)

3.2 Geschwindigkeitsverteilungsfunktion

In den Bereichen der Strömung mit starken Zustandsänderungen innerhalb weniger freier Weglängen werden entsprechend den Experimenten an Standardtrenndüsen starke Abweichungen von der Maxwellgeschwindigkeitsverteilung erwartet. Abb. 3.11 zeigt die Geschwindigkeitsverteilung von 1700 simulierten Molekülen des schweren Isotops im Sammelbereich ($0,974 < r/a \leq 1,0$; $41,2^\circ < \phi < 48,1^\circ$; Zellenspalte 7) nahe der Umlenkwand und dem Anlaufwinkel $\phi^\dagger = 48^\circ$. Für die Knudsenzahl $Kn_c = 0,1$ wird an dieser Stelle der Temperaturschlupf an der Umlenkwand maximal. Die Normierung der Verteilungsfunktion erfolgt mit der Anzahl der Geschwindigkeitsintervalle $NPTV = 60$ und dem Maximalwert der bei der Simulation abgeschnittenen Verteilungsfunktion $(v \cdot \beta)'_{\max} = 3$.

$$f' = \frac{f \cdot 2(v \cdot \beta)'_{\max}}{\beta \cdot NPTV} \quad (3.15)$$

In Radialrichtung (Abb. 3.11a) errechnet man für die Häufigkeitsverteilung (Stufenkurve) die Diffusionsgeschwindigkeit des schweren Isotops $\bar{v}'_{hr} = +0,086$ und die zugehörige Temperatur $T'_{hr} = 2,36$. (Da der Sammelbereich drei Zellen in Radialrichtung nahe der Umlenkwand erfaßt, bildet diese Temperatur den mit den Probengrößen in den Zellen gewichteten Mittelwert dieser drei Temperaturen, Abb. 3.6). Die durchgezogene Verteilungsfunktion entspricht einer Maxwellverteilung mit den oben angegebenen Werten für die mittlere Geschwindigkeit und die Temperatur. Sie veranschaulicht die Abweichung der bimodalen Häufigkeitsverteilung mit Nebenmaximum von der zu $\bar{v}_{hr}$ symmetrischen Maxwellverteilung.

$$f_{v_{hr}} = \frac{\beta_h}{\sqrt{\pi}} \exp \left[-\beta_h^2 (v_{hr} - \bar{v}_{hr})^2 \right] \quad (3.16)$$

$$\text{mit } \beta_h = \sqrt{m_h / 2 k T_{hr}} ;$$

Die unterbrochen gezeichnete Verteilungsfunktion stellt eine Max-

wellverteilung mit der Wand- bzw. Gleichgewichtstemperatur und der mittleren Diffusionsgeschwindigkeit dar.

Die Häufigkeitsverteilung erlaubt, die Moleküle in zwei Klassen einzuteilen:

I. Moleküle, die im Verlauf ihrer Bewegung durch den Simulationsraum mindestens einen Wandstoß erfahren haben $\bar{v}_{hr}^I \sim 0$.

II. Moleküle, die noch nicht die Wand gestoßen haben $\bar{v}_{hr}^{II} > 0$. Die Moleküle der Klasse I bestehen aus einem Teil mit negativer Geschwindigkeit in Radialrichtung, sie wurden entsprechend der Randbedingung - Anzahl der simulierten Teilchen gleich Anzahl der emittierten Teilchen (keine Kondensation oder Verdampfung an der Wand) - entsprechend der Verteilungsfunktion

$$f_{v_{ir}}^- = v_{ir} \frac{\beta_1}{\sqrt{\pi}} \exp[-\beta_1^2 v_{ir}^2] \quad v_{ir} < 0 \quad (3.17)$$

mit der Wandtemperatur ($\beta_1 = \sqrt{\frac{m_1}{2kT_w}}$) reflektiert. Der andere Teil, Moleküle mit positiver Radialgeschwindigkeit, befinden sich nach einem Stoß mit der Wand auf dem Weg zurück zur Wand. Beide Teile lassen sich gut mit der der Wandtemperatur entsprechenden Maxwellverteilung fitten.¹ Die schnellen Moleküle der Klasse II mit einer mittleren Radialgeschwindigkeit, die bei geometrischer Zerlegung des Eintrittsgeschwindigkeitsvektors in Azimutal- und Radialrichtung nahe des Anlaufwinkels ϕ^+ entsteht, spreizen die Geschwindigkeitsverteilungsfunktion und bedingen wegen des großen Gewichts in Gleichung (3.10) einen Anstieg der berechneten Temperatur.

In ähnlicher Weise läßt sich die Häufigkeitsverteilung der Moleküle des schweren Isotops in Strömungsrichtung interpretieren. Die mittlere Azimutalgeschwindigkeit $\bar{v}_{h\phi}' = 0,824$ bleibt wegen der Moleküle, die noch keinen Wandstoß erfahren haben ($\bar{v}_{h\phi}^{II'} = 0,6$), hinter der Geschwindigkeit der bewegten Wand $v_w' = 0,839$ zurück, und die berechnete Temperatur steigt auf $T_{h\phi}' = 1,9$ gegenüber der Wand-

¹ Die Häufigkeitsverteilung muß entsprechend der Anzahl der Moleküle der Klasse II gegenüber der Gesamtzahl niedriger sein.

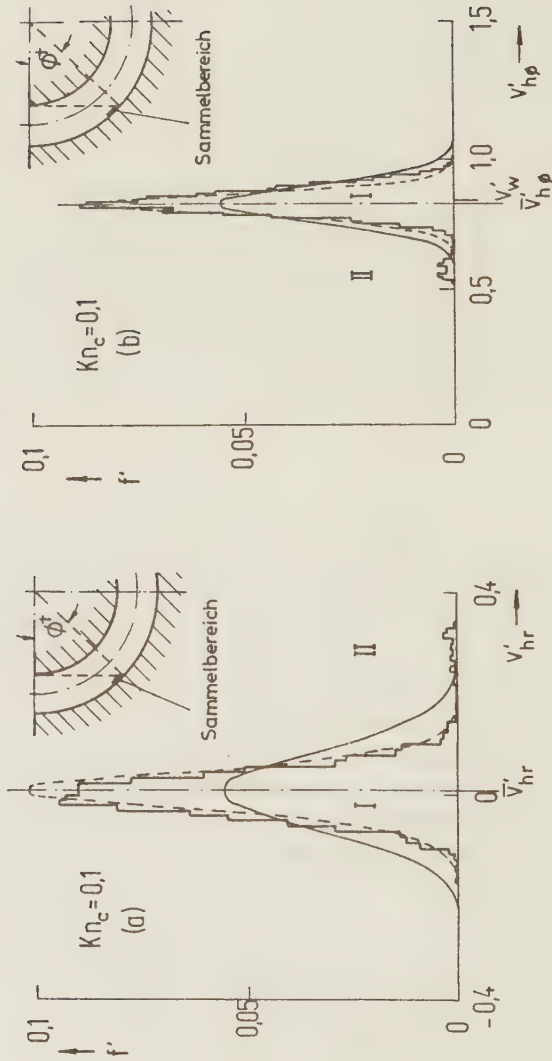


Abb. 3.11. Geschwindigkeitsverteilungsfunktion des schweren Isotops in radialer (a) und azimuthaler (b) Richtung im Sammelbereich am Anlaufwinkel ϕ^+ nahe der Umlenkwand. Berechnete Häufigkeitsverteilung von 1700 Molekülen (Stufenkurve) im Vergleich zur Maxwellverteilung mit gleicher mittlerer Geschwindigkeit und Temperatur (durchgezogene Verteilung) und zur Maxwellverteilung mit Gleichgewichtstemperatur (gestrichelte Verteilung). (v_w = Wandgeschwindigkeit, $v' = v/(2kT_0/m_c)^{1/2}$). (Standardfall)

temperatur von $T'_w = 0,7874$, Abb. 3.11b. Durch die mitbewegte Wand werden Gradienten in Strömungsrichtung unterdrückt (Kap. 2.2.).

Qualitativ sehen die Häufigkeitsverteilungen für das leichte Isotop ähnlich aus. Die Abweichungen der Verteilungsfunktion von der Maxwellverteilung fallen wegen der größeren thermischen Geschwindigkeit kleiner aus. Die Form der Geschwindigkeitsverteilung entspricht einer Verteilung der Longitudinalgeschwindigkeit in einer Stoßwelle (Bird /30/ Fig. 6) und läßt sich mathematisch nach der Methode von Mott-Smith /31/ durch Überlagerung zweier Verteilungsfunktionen behandeln; diese Methode wird auch bei der Auswertung der mit Molekularsondenmessungen gewonnenen Ionenstromprofile verwendet (Ehrfeld /6/ S. 54).

Stromab im Bereich des erwarteten Gleichgewichts ($0 \leq r/a \leq 1,0$; $\phi > 90^\circ$) berechnet man mit einer Probengröße von $N_u = 750$ Molekülen (Summe der leichten und schweren Isotope) aus der Häufigkeitsverteilung für die Radialrichtung, Abb. 3.12, die Diffusionsgeschwindigkeit $\bar{v}'_{ur} = -4 \cdot 10^{-4}$ und die zugehörige Temperatur $T'_{ur} = 0,8$; trotz der geringen Probengröße (Augenblicksaufnahmen der Isotopenmoleküle im Simulationsraum) stimmen diese Werte mit den Gleichgewichtswerten $\bar{v}'_{ur} = 0$ und $T'_{ur} = T'_w = T'_c = 0,7874$ gut überein. Die berechnete Maxwellverteilung deckt sich im Rahmen der Zeichengenauigkeit mit der Maxwellverteilung bei Vorgabe der Gleichgewichtswerte (unterbrochen gezeichnete Linie in Abb. 3.12).

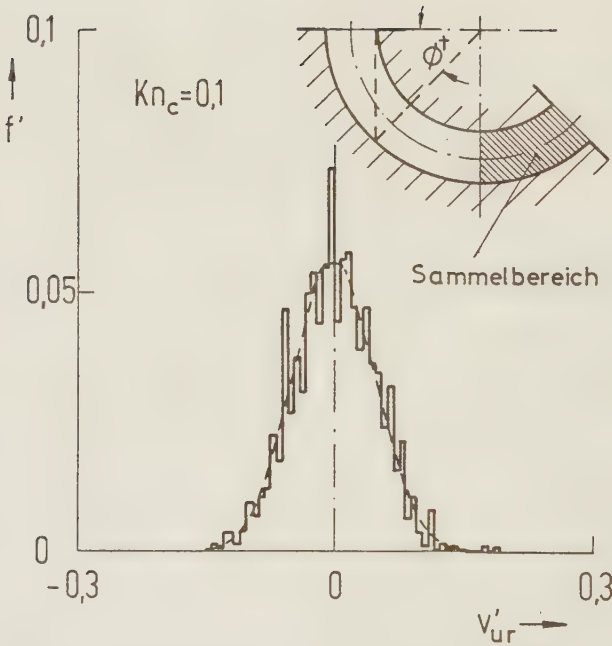


Abb. 3.12. Geschwindigkeitsverteilungsfunktion in radialer Richtung der im Simulationsraum vorhandenen Isotope im Bereich des erwarteten Gleichgewichts. Berechnete Häufigkeitsverteilung von 750 Molekülen (Stufenkurve) und Maxwellverteilung mit Gleichgewichtsdaten (gestrichelte Verteilung). ($v' = v/2kT_0/m_C$)^{1/2}). (Standardfall)

3.3. Isotopentrennung

Im Verlauf der Umlenkung trennen sich das leichte Trägergas und das Isotopengemisch und die Isotope untereinander. Die radiale Verschiebung der Komponente i läßt sich durch das Verhältnis des Molstroms der Komponente i in der leichten Fraktion zum Molstrom der Komponente i im gesamten Querschnitt an einem Umlenkwinkel ϕ beschreiben. Das Abschälverhältnis θ_i ist definiert durch

$$\theta_i = \int_0^r n_i v_{i\phi} dr / \int_0^a n_i v_{i\phi} dr. \quad (3.18)$$

Mit der Gleichgewichtsteilchendichte und dem Gleichgewichtsgeschwindigkeitsprofil $v_{i\phi} = \omega(r + R_{in})$ kann man das Gleichgewichtsabschälverhältnis einer Komponente i berechnen

$$\theta_i^\infty = \frac{\exp [B_i (r + R_{in})^2] - \exp [B_i R_{in}^2]}{\exp [B_i (a + R_{in})^2] - \exp [B_i R_{in}^2]} \quad (3.19)$$

$$B_i = m_i \omega^2 / 2kT.$$

Ein Maß für die Trennung zwischen einer leichten und einer schweren Komponente erhält man, wenn das Verhältnis des Molstroms der leichten Komponente zum Molstrom der schweren Komponente in der leichten Fraktion mit dem Verhältnis des Molstroms der schweren Komponente zum Molstrom der leichten Komponente in der schweren Fraktion multipliziert wird. Der Trennfaktor A läßt sich dann auch durch die Abschälverhältnisse ausdrücken

$$A = \frac{\theta_{\text{leichte Komp.}}}{(1 - \theta_{\text{leichte Komp.}})} \cdot \frac{(1 - \theta_{\text{schwere Komp.}})}{\theta_{\text{schwere Komp.}}} \quad (3.20)$$

Für jede Kombination zwischen einer leichten und einer schweren Komponente ergibt sich ein Trennfaktor, der für vollständige Anreicherung gegen unendlich geht (wenn die leichte Komponente angereichert werden soll) und ohne Konzentrationsverschiebung gleich eins ist. Für das ternäre Gemisch aus Isotopen und Trägergas in der Trenndüse interessieren nur die Trennung zwischen Trägergas und Isotopen-

gemisch A_{Cu} und die Trennung zwischen leichtem und schwerem Isotop A_{lh} . Wenn man die entsprechenden Abschälverhältnisse in Gleichung (3.20) einsetzt, resultiert für den Gemischtrennfaktor A_G

$$A_G = A_{Cu} = \frac{\theta_c (1 - \theta_u)}{\theta_u (1 - \theta_c)} \quad (3.21)$$

und für den Trennfaktor der Isotope A_I

$$A_I = A_{lh} = \frac{\theta_l (1 - \theta_h)}{\theta_h (1 - \theta_l)} . \quad (3.22)$$

Die Trennung der Isotope wird dann qualitativ durch den Elementareffekt der Isotopentrennung ϵ_A (im weiteren kurz Trenneffekt genannt), der die Abweichung des Trennfaktors der Isotope von seinem Ausgangswert eins (keine Trennung) darstellt, beschrieben

$$\epsilon_A = A_I - 1, \quad (3.23)$$

da nur die Änderung gegenüber dem Ausgangswert interessiert. Setzt man den Trennfaktor A_I in Gleichung (3.23) ein, so bestimmt im wesentlichen die Differenz der Abschälverhältnisse $\theta_l - \theta_h$ den Trenneffekt

$$\epsilon_A = \frac{\theta_l - \theta_h}{\theta_h (1 - \theta_l)} \quad (3.24)$$

Das mit der Tracer-MC-Simulation für $Kn_c = 0,02$ berechnete Feld des Trenneffekts ϵ_A als Funktion des Abschälverhältnisses des Isotopengemisches θ_u und des Umlenk winkels ϕ ist in Abb. 3.13. wiedergegeben. Das Abschälverhältnis ist gleich null für $r/a = 0$ und wird eins für $r/a = 1$, da dann der Molstrom in der leichten Fraktion dem Molstrom der Komponente im gesamten Strom entspricht. Der Verlauf des Trenneffekts für ein konstantes Abschäl-

verhältnis $\theta_u = 0,25^1$ zeigt deutlich ein Überschwingen des Trenneffekts, mit einem maximalen Trenneffekt ϵ_{Amax} bei $\phi \sim 100^\circ$. Die Verminderung des Abschälverhältnisses des Isotopengemisches in der Zellenzeile mit dem Radius $r/a = 0,99$ längs des Umlenk winkels wird durch die Strich-Punkt-Linie markiert. Da die Isotope mit zunehmendem Umlenk Winkel immer dichter an der Umlenk wand bis zur Gleichgewichtsverteilung konzentriert werden, muß das Abschälverhältnis für einen konstanten Radius bis zum Gleichgewichtswert θ_u^∞ kontinuierlich abnehmen, wie in Abb. 3.14 gezeigt wird.

Den herausragenden Einfluß der Reflexion an einer diffus reflektierenden Wand erkennt man im Anlaufbereich für kleine Umlenk Winkel. Dort entwickelt sich zuerst der Trenneffekt, mit zunehmendem Umlenk Winkel wird die verzögernde Wirkung des Trägergases sichtbar, und das Profil des Trenneffekts für einen konstanten Winkel entspricht im funktionalen Zusammenhang der Abhängigkeit des Gleichgewichtstrenneffekts ϵ_A^∞ vom Abschälverhältnis θ_u , wenn die Gleichgewichtswerte θ_i^∞ aus Gleichung (3.19) in die Beziehung für den Trenneffekt (Gl. 3.24) eingesetzt werden.

Der Vergleich mit aus Molekularsondenmessungen eines He/SF₆-Gemisches gewonnenen Trenneffektverläufen in einer Standard-Trenndüse (Schmid /32/ S. 29) ergibt im Anlaufbereich Unterschiede, da in der realen Düse am Anfang wegen der entgegengesetzten Stromlinienkrümmung im Düsenzulauf die schwere Komponente an der Innenwand angereichert wird. Ab $\phi = 45^\circ$ steigt bei den Molekularsondenmessungen der Trenneffekt von der Umlenk wand zur Innenwand stetig an. Der Gradient $\partial \epsilon_A / \partial \theta$ ist nicht so steil wie bei der MC-Simulation ausgebildet, da die Massendifferenz von S³²F₆ wesentlich geringer ist als die des Modellgases der MC-Simulation.

¹Die normierte Trennleistung durchläuft mit dem Trenneffekt im Gleichgewicht zwischen Druck- und Konzentrationsdiffusion nahe dem Uranabschälverhältnis 0,2 das Maximum / 6 /. Aus Nichtvermischungsbedingungen der Kaskadentheorie sind Stromaufteilungsverhältnisse von 1/2, 1/3, 1/4 schaltungstechnisch günstig, daraus folgt $\theta_u = 0,25$.

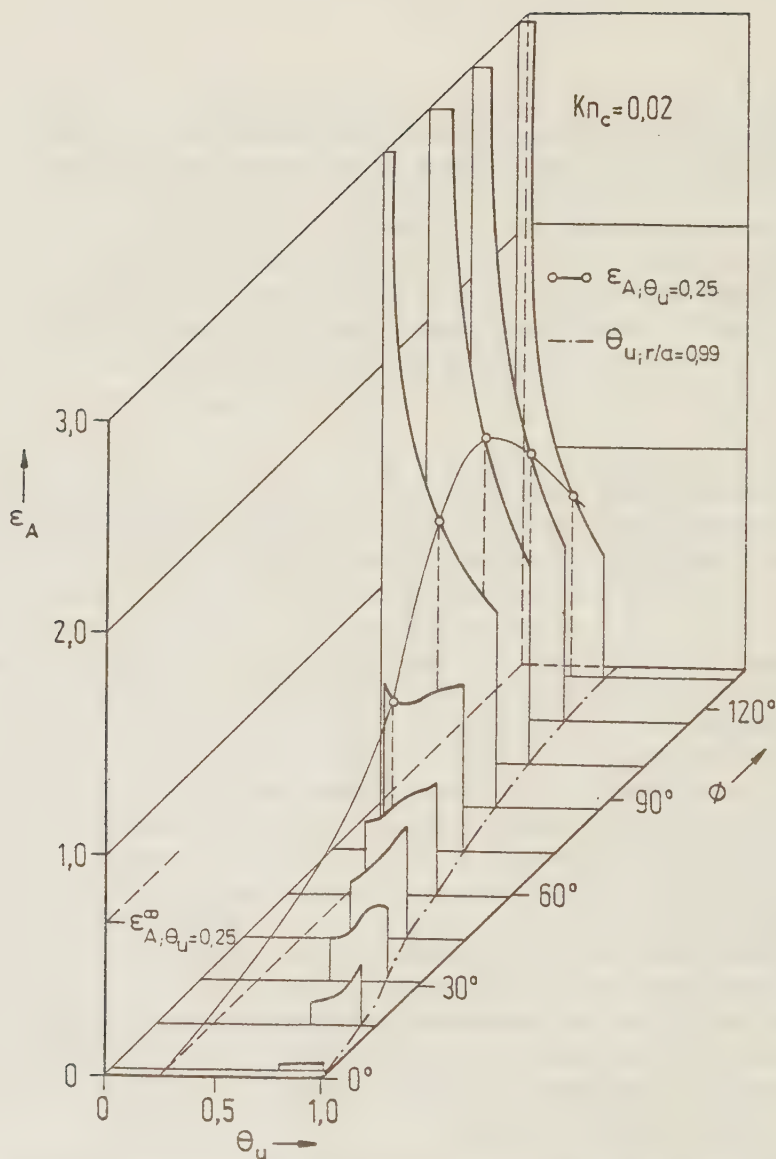


Abb. 3.13. Berechnetes Feld des Trenneffekts ϵ_A für $Kn_c = 0,02$ in Abhängigkeit vom Isotopengemischabschälverhältnis θ_u und vom Umlenkwinkel ϕ . Die Verbindungslinie der Kreise (o - o) kennzeichnet den Verlauf des Trenneffekts als Funktion des Umlenkwinkels für konstantes Abschälverhältnis $\theta_u = 0,25$. Die Strich-Punkt-Linie markiert den Verlauf des Isotopenabschälverhältnisses für konstanten Radius $r/a = 0,99$. (ϵ_A^0 obere Grenze der Gleichgewichtsentmischung). (Standardfall)

Das Überschwingen des Trenneffekts über die obere Grenze der Gleichgewichtsentmischung ϵ_A^∞ läßt sich anschaulich an der Entwicklung der Differenz der Isotopenabschälverhältnisse zeigen (Abb. 3.14). Das Abschälverhältnis des fest vorgegebenen Trägergases ändert sich für konstanten Radius längs des Umlenk winkels nicht. Im Verlauf der Umlenkung nimmt für einen konstanten Radius mit der Verschiebung des Partialdichteprofiles zur Umlenk wand das Abschälverhältnis einer Tracer-Komponente i bis zum Gleichgewichts-wert θ_i^∞ ab. Das Trägergas hindert das leichte Isotop wirksamer an der Diffusion. Der Betrag der Differenz der Isotopenabschälverhältnisse wird immer größer und der Trenneffekt wächst entsprechend der Gleichung (3.24) auch über die Schranke der oberen Grenze der Gleichgewichtsentmischung ϵ_A^∞ . Dann wird ein Zustand erreicht, in dem das schwere Isotop nahezu die Gleichgewichtsverteilung erreicht hat und das leichte Isotop sich noch auf dem Weg zur Gleichgewichtsverteilung befindet. Die Differenz zwischen den Isotopenabschälverhältnissen verringert sich, und der Trenneffekt sinkt stetig vom Maximalwert $\epsilon_{A_{\max}}$ bis zur oberen Grenze der Gleichgewichtsentmischung ϵ_A^∞ , wenn beide Isotope den Wert für das Gleichgewicht der Isotopenabschälverhältnisse ($\theta_1^\infty - \theta_h^\infty$) erreicht haben. Dieser Zusammenhang besteht auch für die Änderung von $\theta_1 - \theta_h$ längs einer Molstromfläche mit $\theta_u = \text{konst}$ (Abb. 3.13).

Die Variation der Knudsenzahl als Parameter für die Effektivität der Stöße Isotop-Trägergas und umgekehrt bei sehr kleinen Isotopenkonzentrationen läßt erkennen, daß die Anlaufkennzahl $\phi \cdot Kn_c$ der zwei unabhängigen binären Diffusionsgleichungen der Isotope im Trägergas nach der Chapman-Enskog-Näherung nicht gilt (Abb. 3.15). Der Entmischungsvorgang zwischen den Isotopen für konstantes Geschwindigkeitsverhältnis und feste Düsengeometrie müßte bei großen Knudsenzahlen augenblicklich, also bei kleinen Umlenk winkeln, abgeschlossen sein, während bei der gaskinetischen Beschreibung des Problems und freier Molekularströmung erst der Anlaufwinkel $\phi^+ = 48^\circ$ für $a/(a+R_{in}) = 1/3$ durchlaufen werden muß, ehe die Trennung zwischen den Isotopen durch die Stöße an einer diffus reflektierenden Wand vollkommen abgeschlossen ist. Mit fallender Knudsenzahl wächst das

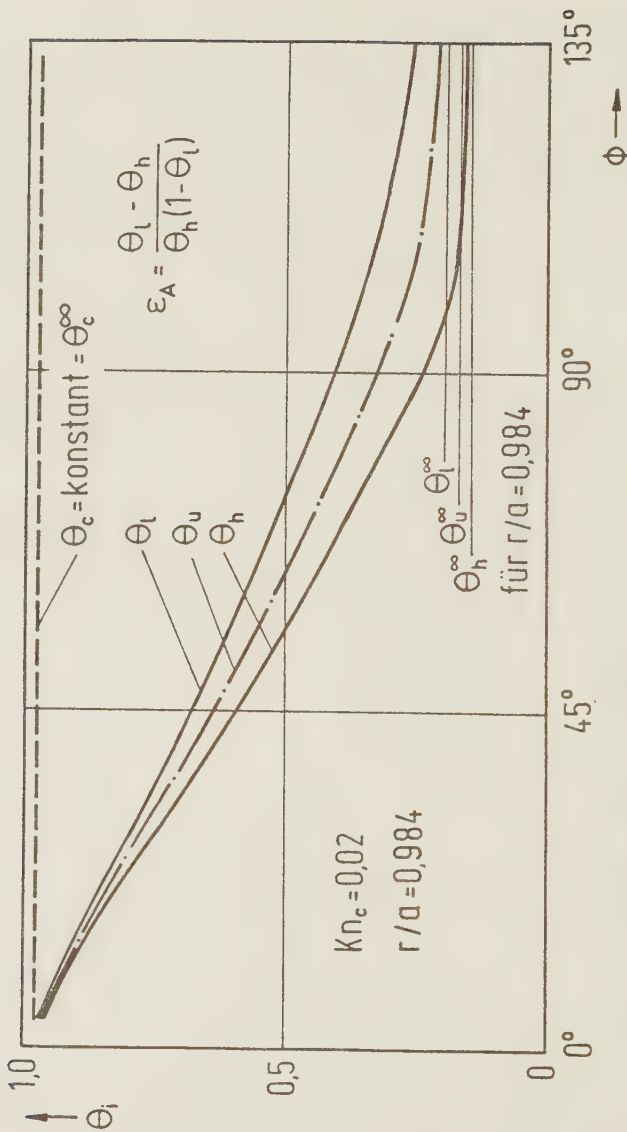


Abb. 3.14. Entwicklung der partiellen Isotopenabschälverhältnisse θ_i für konstanten Radius längs des Umlenkwinkels ϕ . (θ_i^∞ Gleichgewichtsabschälverhältnis nach Gl. (3.19), $i = l, u, h$, $Kn_c = 0,02$) (Standardfall)

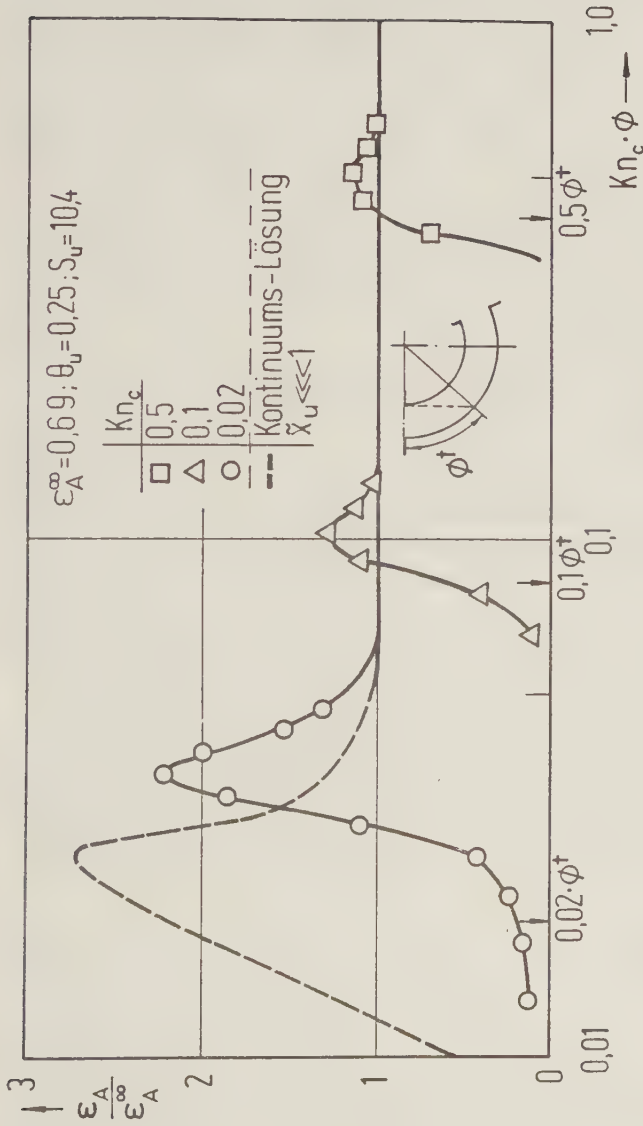


Abb. 3.15. Mit der Tracer-MC-Simulation berechnete Abhängigkeit des normierten Trenneffekts $\varepsilon_A/\varepsilon_A^\infty$ von der Anlaufkennzahl $Kn_c \cdot \phi$ für unterschiedliche Knudsenzahlen im Vergleich zu einer Lösung zweier binärer Diffusionsgleichungen nach der Chapman-Enskog-Theorie. (Standardfall)

maximale Überschwingen des Trenneffekts über den konstanten Grenzwert der Gleichgewichtsentmischung ($S_u \gg 1$ im Standardfall) $\epsilon_{Amax}/\epsilon_A^\infty$ vom Wert eins bei freier Molekularströmung (ohne Trägergasstöße besteht für die Isotope kein Mechanismus der transitorischen Überhöhung der Isotopentrennung) bis auf $\epsilon_{Amax}/\epsilon_A^\infty = 2,2$ einer Strömung im Übergangsgebiet ($Kn_C = 0,02$) an. Der Grenzwert maximalen Überschwingens nach der Kontinuumsrechnung, der entsprechend den Überlegungen im Kapitel 3.1 einen oberen Grenzwert für ϵ_{Amax} darstellt (Maximum der unterbrochenen Linie in Abb. 3.15), wird durch Verdünnungseffekte abgebaut. Die Differenz zwischen diesem Maximalwert und ϵ_{Amax} der MC-Simulation wächst wie erwartet mit steigender Knudsenzahl und verhält sich ebenso wie das Temperaturnichtgleichgewicht zwischen Isotopengemisch und dem im Gleichgewicht befindlichen Trägergas (siehe auch Abb. 3.7). Hohe Nichtgleichgewichtstemperaturen der Isotope reduzieren die Trennung, da die Geschwindigkeitsverhältnisse der Isotope verkleinert werden. (Vergleich: Berkahn /23/S. 16 zum Einfluß des Geschwindigkeitsverhältnisses auf die Trennung der Isotope in der Trenndüse). Die größere Diffusionshemmung bei fallender Knudsenzahl verlangsamt die Bewegung der Isotope zur Umlenk wand und der Umlenk winkel des Zustandes maximalen Überschwingens der Isotopentrennung $\phi_{\epsilon_{Amax}}$ wird von $\phi_{\epsilon_{Amax}} = 60^\circ$ ($1,05$ rad) für $Kn_C = 0,1$ zu $\phi_{\epsilon_{Amax}} = 100^\circ$ ($1,7$ rad) für $Kn_C = 0,02$ verschoben. Nach der Kontinuumstheorie erreicht der Trenneffekt bei der Anlaufkennzahl $Kn_C \cdot \phi = 0,025$ seinen Maximalwert, danach müßten die entsprechenden Umlenk winkel für $Kn_C = 0,1$ gleich $14,3^\circ$ und für $Kn_C = 0,02$ gleich $71,6^\circ$ betragen. Die Abweichung der Umlenk winkel wächst mit steigender Knudsenzahl.

Die vorgestellten Ergebnisse sind nach Kapitel 2.1 fehlerbehaftet. Das Hauptproblem bei der MC-Simulation stellt bei beschränktem Speicherplatz die langsame Konvergenz der Ergebnisse dar (Fehler $\sim \sqrt{N}$; Rechenzeit $\sim N$; N Probengröße in einer Zelle). Die natürlichen Uranisotope besitzen nur die geringe Differenz der relativen Molekülmasse $\Delta \tilde{m} = 3$, so daß die Differenz der Abschälverhältnisse der Isotope $\theta_l - \theta_h$, aus der sich der Trenneffekt ϵ_A ermitteln läßt, von zwei nahezu gleich großen Werten gebildet wird. Die benötigte Probengröße in einer Zelle kann über den Gleichgewichtstrenneffekt bei vorgegebenem Uranabschälverhältnis abgeschätzt werden.

$$\epsilon_A^\infty \sim \frac{\theta_l - \theta_h}{\theta_u (1 - \theta_u)} \sim \frac{\Delta \tilde{m}}{\tilde{m}_u} \cdot \frac{|\ln \theta_u|}{1 - \theta_u}$$

$\theta_l - \theta_h / \theta_u \sim 0,01$ für $\Delta \tilde{m} = 3$; $\tilde{m}_u = 350$; $\theta_u = 0,25$.

Die Annahme, die Größenordnung der Störung (Nichtgleichgewichtseffekte) liege bei 10 %, führt dazu, daß der Fehler bei der Berechnung von θ_l nicht größer als 0,1 % sein darf. Aus $\delta\theta = 1/\sqrt{N}$ folgt $N = 10^6$. Der zur Verfügung stehende Rechner PDP11/40 (Berechnungsmöglichkeit von $2 \cdot 10^5$ Stößen pro Stunde) benötigt für einen Sammelzeitschritt 0,8 Stunden im Standardfall mit 200 Zellen und 7 Tracermolekülen je Isotopensorte in der Zelle (Knudsenzahl $Kn_c = 0,1$). Das Problem verschlingt die unmögliche Rechenzeit von 13 Jahren.

Eine Spreizung der Massendifferenz auf $\Delta \tilde{m} = 100$ unter der Voraussetzung der gleichen Größenordnung des Fehlers bei der Berechnung von ϵ_A bewirkt eine Reduzierung der Rechenzeit auf 4 Tage.

Dies ist neben der Hervorhebung der Nichtgleichgewichtseffekte zwischen den Isotopen der Grund, bei der MC-Simulation die Massendifferenz des Modellgases zu erhöhen.

Die direkte Proportionalität zwischen dem Kehrwert der Wurzel aus der Probengröße und dem mittleren relativen Fehler wird im Rahmen der Tracer MC-Simulation bei den direkt berechneten makroskopischen Feldgrößen wie Teilchendichte und Geschwindigkeit der Kompo-

nenten gut erfüllt (dazu Abb. 3.12), selbst der Fehler des Isotopengemischabschälverhältnisses unterliegt diesem Zusammenhang.

Die Verknüpfung des erwarteten Fehlers $\delta \epsilon_A^\infty$ und die Steigerung des Gleichgewichtstrenneffektes ϵ_A^∞ mit der Vergrößerung der Massendifferenz zwischen den Isotopen zeigt Abb. 3.16. Der mittlere relative Fehler wird unter der Voraussetzung berechnet, daß die Verteilung der Isotope im Isotopengemisch gleich groß ist $\bar{x}_l = \bar{x}_h$, und daß die mittleren Fehler bei der Berechnung der Abschälverhältnisse additiv und gleich groß sind; mit diesen Annahmen läßt sich das Verhältnis der relativen Fehler des Trenneffekts $\delta \theta_u / \delta \epsilon_A$ als Funktion des Trenneffekts ϵ_A und Isotopengemischabschälverhältnisses θ_u oder der Differenz der Isotopenabschälverhältnisse $\theta_l - \theta_h$ darstellen (Anhang III). Für die Abbildung 3.16 wird ein relativer Fehler bei der Berechnung des Abschälverhältnisses von $\delta \theta_u = 0,03$ angenommen. Steigt die Differenz der relativen Molekülmassen von $\Delta \bar{m} = 3$ auf $\Delta \bar{m} = 100$, so steigt ϵ_A^∞ von 0,015 auf 0,699 und der mittlere relative Fehler sinkt von 360 % auf 14 %.

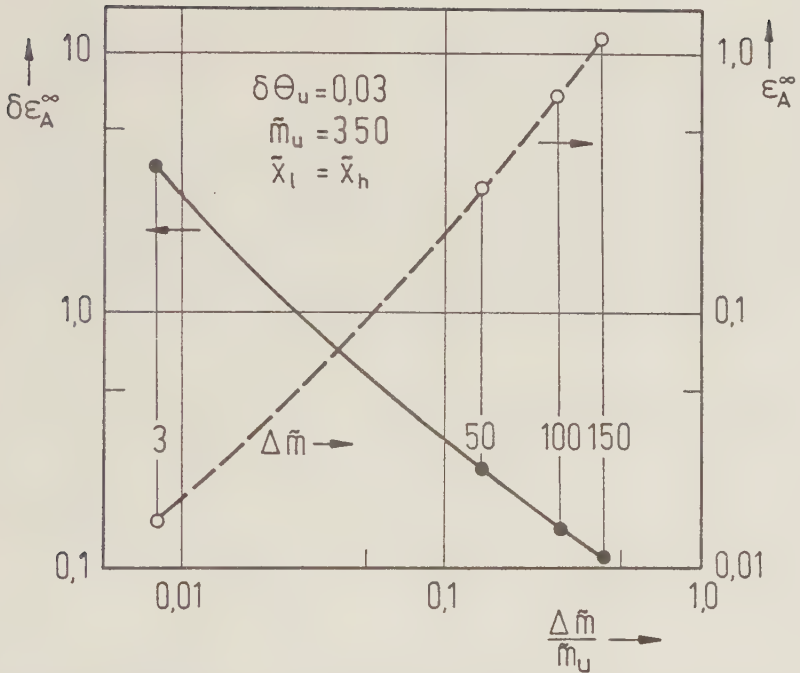


Abb. 3.16. Trenneffekt an der oberen Grenze der Gleichgewichtsentmischung ϵ_A^∞ als Funktion der relativen Massendifferenz der Isotope $\Delta\tilde{m}/\tilde{m}_u$ und zugehöriger maximaler relativer Fehler $\delta\epsilon_A^\infty$ mit den Voraussetzungen additiver mittlerer Fehler der Isotopenabschälverhältnisse und Gleichverteilung der Isotope im Isotopengemisch $\tilde{x}_l = \tilde{x}_h$.

4. Einfluß molekularer Verhältnisse und Randbedingungen auf die Isotopenentmischung

4.1. Isotopengemischkonzentration

4.1.1. Eingefrorenes Trägergasfeld

Bei Erhöhung der Konzentration der Isotope von Spurenkonzentration $\tilde{x}_u = 5 \cdot 10^{-2} \%$ in Richtung der Konzentration in der realen Trenndüse $\tilde{x}_u = 5 \%$ und Simulation für $Kn_C = 0,1$ mit dem Tracer-Modell, d.h. mit eingefrorenem Feld des leichten Trägergases, führen die Stöße der Isotope untereinander zu einer Reduktion der Geschwindigkeits- und Temperaturdifferenzen zwischen den Isotopen und das Überschwingen des Trenneffekts über den Gleichgewichtswert verschwindet. Die Trennung zwischen den Isotopen läuft langsamer ab und die Gleichgewichtslage wird erst bei einem größeren Umlenkwinkel erreicht. (Abb. 4.1 $Kn_C = 0,1$; $\tilde{x}_u = 0,0005$ (Δ) und $\tilde{x}_u = 0,05$ (Δ)). Die Stöße der Isotope untereinander (u-u Stöße) werden durch die Knudsenzahl Kn_{uu} charakterisiert. Das berechnete Verhältnis Kn_{uu}/Kn_C ist gleich 3,5, für $\tilde{x}_u = 5\%$. Das zeigt, die Stöße der Isotope untereinander sind sogar bei $Kn_C = 0,1$ effektiv.

Die Simulation mit unterdrückten u-u Stößen und ausschließlicher Berechnung der Stoßkombinationen c-u und u-c, also einer unabhängigen Simulation zweier binärer Systeme Isotop-leichtes Trägergas zeigt, daß die u-u Stöße, weil die Knudsenzahl für diese Stöße sich umgekehrt proportional zur Isotopengemischkonzentration $\tilde{x}_u$ verhält und somit Kn_{uu} für $\tilde{x}_u = 5 \cdot 10^{-2} \%$ um den Faktor 10^2 größer als für $\tilde{x}_u = 5 \%$ ist, selbst bei $Kn_C = 0,02$ ohne Einfluß sind, diese Tatsache wird durch Chatwani (/9/ Abb.4) bestätigt. (Abb. 4.1 $\tilde{x}_u = 0,0005$; $Kn_C = 0,1$ (Δ) ohne eingezeichneten Vergleich; $Kn_C = 0,02$ (O) und ($\bullet$)). Die eingetragene Fehlerbandbreite für $Kn_C = 0,02$ ergibt sich nach Anhang III mit dem örtlichen Trenneffekt und Fehler des Uranabschälverhältnisses.

Mit unterdrückten u-u Stößen bei einer Simulation mit $\tilde{x}_u = 5 \%$ tritt gegenüber der Berechnung mit allen Stoßpaaren ein Überschwingen des Trenneffekts auf (Abb. 4.1 $Kn_C = 0,1$; $\tilde{x}_u = 0,05$ (Δ) und 1(Δ)).

Das Überschwingen des Trenneffekts führt zu einem ähnlich hohen Betrag wie für Spurenkonzentration, lediglich das Maximum wird bei größerem Umlenkwinkel erreicht. Die verschobene Lage des maximalen Trenneffekts kann durch das geringe Geschwindigkeitsverhältnis für die Isotope bei gleichem Geschwindigkeitsverhältnis für die Gemischströmung wegen der größeren mittleren relativen Molekülmasse des Gemisches bei $\tilde{x}_u = 5\%$ erklärt werden ($\tilde{m}_u = 350$ aber $\tilde{m}_{5\%} = 19,4$ und $\tilde{m}_{0,05\%} = 2,17$; $S_u/S = \sqrt{\tilde{m}_u/\tilde{m}}$). Das Nichtgleichgewicht zwischen Isotopengemischtemperatur und der festgehaltenen Trägergastemperatur im Feld ist für $\tilde{x}_u = 5\%$ um den Faktor 8 kleiner als für $\tilde{x}_u = 5 \cdot 10^{-2}\%$, diese Tatsache führt trotz niedrigerem Geschwindigkeitsverhältnis zu einem Überschwingen wie bei Spurenkonzentration (Abb. 4.1 $Kn_c = 0,1$; $\tilde{x}_u = 0,05$ (▲) und $\tilde{x}_u = 0,0005$ (▲)).

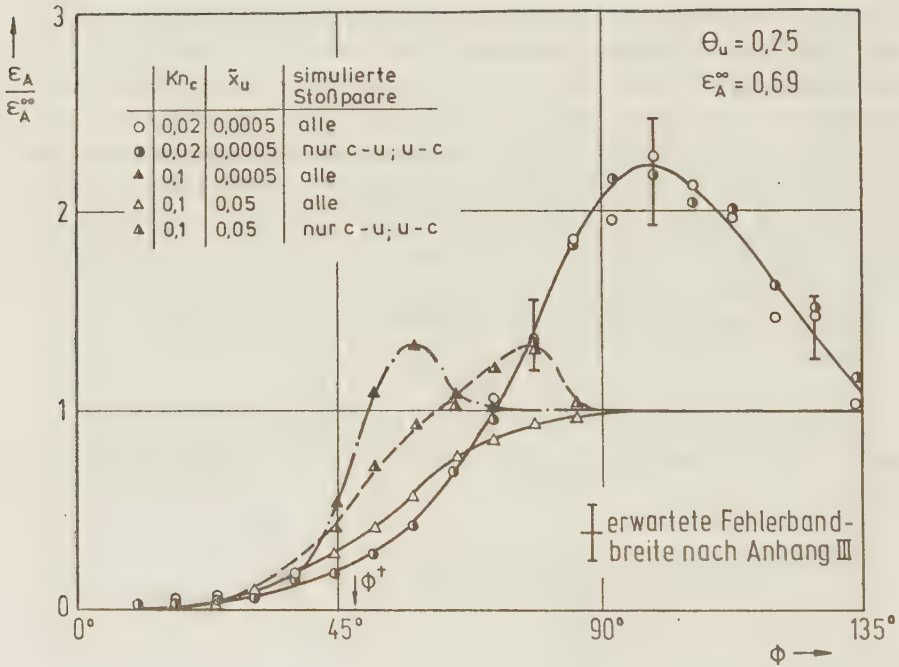


Abb. 4.1. Auf den Gleichgewichtswert ϵ_A^∞ normierter Trenneffektverlauf ϵ_A für konstantes Isotopengemischabschälverhältnis θ_u in Abhängigkeit vom Umlenkwinkel ϕ . Einfluß der Kombination der möglichen Stoßpartner bei Tracer MC-Simulation für unterschiedliche Knudsenzahlen und Isotopenkonzentrationen. (Abweichung vom Standardfall: Simulation zweier unabhängiger binärer Systeme mit den Stoßpaaren nur c-u; u-c; $\tilde{x}_u = 0,05$)

4.1.2. Bewegung sämtlicher Gemischkomponenten

Die Vorgabe einer Spurenkonzentration für das Isotopengemisch $\tilde{x}_u = 5 \cdot 10^{-2} \%$ erlaubt die Simulation mit der Tracer-MC-Methode, weil keine Rückwirkungen der Stöße der Isotope auf das Trägergas entstehen. Um den Einfluß der Stöße der Isotope untereinander herauszuarbeiten, wird für die Rechnungen im Punkt 4.1.1. die Isotopengemischkonzentration auf $\tilde{x}_u = 5 \%$ heraufgesetzt. Die Tracer-Simulationsmethode wird beibehalten, d.h. das Feld der Trägergasmoleküle bleibt ohne Rückwirkung trotz der vermehrten Zahl von Isotopenstößen. Nun ändert sich aber mit steigender Isotopenkonzentration die mittlere Masse des Gemisches

$$m = \tilde{x}_c m_c + \tilde{x}_u m_u. \quad (4.1)$$

Für Spurenkonzentration entspricht die mittlere Masse des Gemisches bis auf eine geringe Abweichung der Masse des Trägergases $\tilde{m}/\tilde{m}_c$ ($\tilde{x}_u = 5 \cdot 10^{-2} \%$) = 1,087, und das Eintrittsdichteprofil nach Gleichung (4.2)

$$\frac{\partial \ln n}{\partial r} = \frac{m \omega^2 (r + R_{in})^2}{(r + R_{in}) kT} \quad (4.2)$$

bleibt über dem Radius nahezu gleich der Dichteverteilung des Trägergases im Gleichgewicht. Eine Verschiebung der Molstromflächen des Trägergases mit steigendem Umlenkwinkel findet nicht statt, und die Anwendung der Tracer-MC-Methode ist auch unter diesem Gesichtspunkt gerechtfertigt. Für erhöhte Isotopenkonzentration $\tilde{x}_u = 5 \%$ steigt das Verhältnis der mittleren Masse des Gemisches zur Trägergasmasse auf $\tilde{m}/\tilde{m}_c$ ($\tilde{x}_u = 5 \%$) = 9,8. Das bedingt ein steileres Dichteprofil am Eintritt für das Trägergas nach Gleichung (4.3)

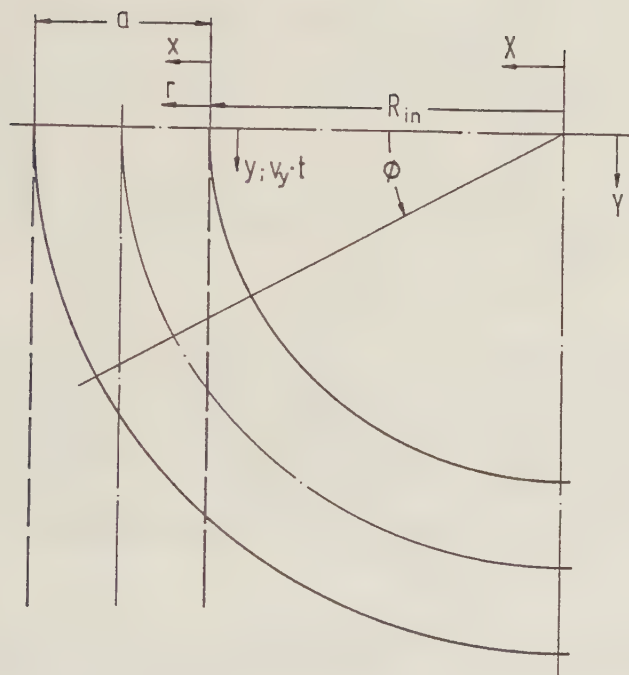
$$n_c = \tilde{x}_c n \quad (4.3)$$

mit der Gesamtdichte n nach Gleichung (4.2) und m nach (4.1). Das Gleichgewichtsprofil des Trägergases stellt sich unabhängig von den anderen Gemischkomponenten und der Ausgangskonzentration nach Gleichung (4.2) mit $m = m_c$ ein. Daraus folgt eine Bewegung der Trägergasmoleküle von der Umlenk wand zur Innenwand ($r/a = 0$), die der Bewegung der Isotope entgegengerichtet ist. Um den Einfluß der Bewegung der Isotope bei $\tilde{x}_u = 5\%$ auf Nichtgleichgewicht und Trennung zu untersuchen, muß die Tracer-Simulationsmethode aufgegeben werden und die vollständige Simulationsmethode, die die Bewegung aller Komponenten des ternären Gemisches im Simulationsraum zuläßt, zur Anwendung gelangen.

Da eine sinnvolle Simulation mit vertretbaren Fehlergrenzen der Ergebnisse für ein Drei-Komponentengemisch im zweidimensionalen Kanal bis zu dem für das Erreichen des Gleichgewichts bei $\tilde{x}_u = 5\%$ notwendigen Umlenk Winkel wegen des Speicherplatzbedarfs auf dem verwendeten Rechnermodell PDP 11/40 nicht möglich ist, wird auf ein instationäres eindimensionales vollständiges MC-Simulationsmodell übergegangen (Chatwani /9/S. 534). Das Koordinatensystem zeigt Abb. 4.2. Der zylindrische Kanal mit Zirkularströmung wird durch das Analogon eines geraden Kanals mit aufgeprägter Kraft in positiver x -Richtung Gl. (4.4) und konstantem Geschwindigkeitsprofil simuliert, bei dem für eine isotherme, reibungsfreie vollentwickelte Strömung der Druckgradient normal zur Wand des geraden Kanals identisch mit dem radialen Druckgradienten im zylindrischen Kanals ist.

$$F_{ix} = m_i g_x = \frac{m_i v_y^2(x)}{x + R_{in}} \quad (4.4)$$

Die Randbedingung der mitbewegten Wand wird aufrechterhalten, dadurch wird es möglich, das Koordinatensystem mit der mittleren Strömungsgeschwindigkeit $\bar{v}_y$ fortzubewegen (Lagrange-Koordinatensystem) und das zweidimensionale Problem als eindimensionale zeitabhängige Simulation für das ternäre System auf dem Kleinrechner durchzuführen.



Referenz - System $X - Y$

gerader Kanal $x - y$

zylindrischer Kanal $r - \phi$

Koordinate in Strömungsrichtung $\phi = \frac{y}{R_{in} + 0,5a}$

Zeitmaßstab $t = y/v_y(x/a=0,5)$

Abb. 4.2. Koordinatensystem des geraden und zylindrischen Kanals im Referenzsystem.

Die Transformation lautet

$$\phi = \frac{v_y \cdot t}{R_{in} + 0,5a} \quad (4.5)$$

Gleichung (4.2) geht dann über in

$$\frac{\partial \ln n}{\partial x} = m g_x / kT \quad (4.6)$$

$$\text{mit } g_x = \frac{v_y^2(x)}{x + R_{in}}$$

Die Massenabhängigkeit des Eintritts- und Gleichgewichtsdichteprofiles für das Trägergas in Abhängigkeit von der Isotopenkonzentration $\tilde{x}_u$ stellt sich wie beim zylindrischen Kanal erläutert dar. Das Gleichgewichtsprofil des ternären Gemisches stellt sich ebenfalls nach Gleichung (4.6) ein, aber mit $m = m^\infty$. Die mittlere Masse des Gemisches wird von der örtlichen Gleichgewichtskonzentrationsverteilung $\tilde{x}_i(x)^\infty$ bestimmt

$$m^\infty = \tilde{x}_c(x)^\infty m_c + \tilde{x}_l(x)^\infty m_l + \tilde{x}_h(x)^\infty m_h \quad (4.7)$$

Die Grenzen, innerhalb derer sich die Verschiebung der Dichteprofile für $\tilde{x}_u = 5\%$ abspielt, zeigt Abb. 4.3, in der alle Dichten auf die Ruhedichte n_0 normiert sind.

Weil das Relaxationszeitverhältnis zwischen Trägergas und Isotopen $\tau_c/\tau_u \sim 0(10^{-2})$ ist und τ_c/τ_s bei eins liegt (Anhang I), wird sich das Dichteprofil des Trägergases schneller als das Gemischdichteprofil, das im Bereich der Umlenkwand $0,8 < x/a \leq 1,0$ von der Konzentrationsverteilung der Isotope bestimmt wird, entsprechend dem Gleichgewichtsprofil einstellen.

Die Abbildung 4.4 stellt die Entwicklung der Dichteprofile für $Kn_c = 0,1$ (a+b) und $Kn_c = 0,02$ (c+d) gegenüber. Für die große Knudsenzahl schließt der Einstellvorgang für das Trägergas nach t_2 ent-

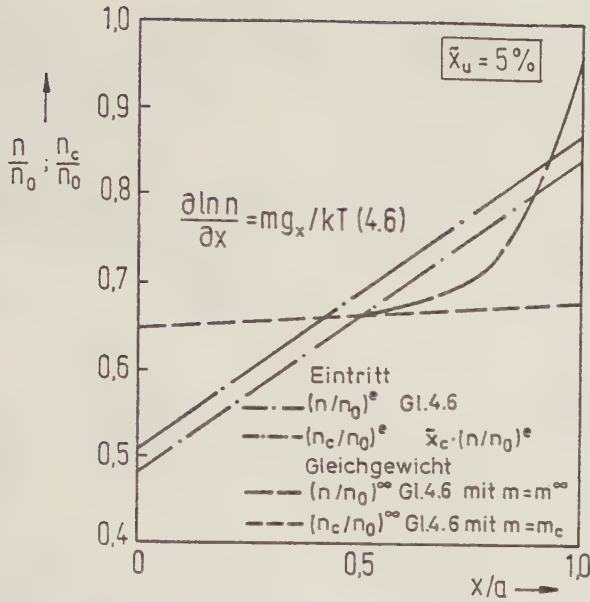


Abb. 4.3. Grenzen der Dichteverteilung des ternären Gemisches (n) und des leichten Trägergases (n_c) am Eintritt (e) und im Gleichgewicht zwischen Druck- und Konzentrationsdiffusion (∞) als Funktion des normierten Abstands x/a für die Isotopenkonzentration $\tilde{x}_u=5\%$. (n_0 Dichte in der Ruhekammer)

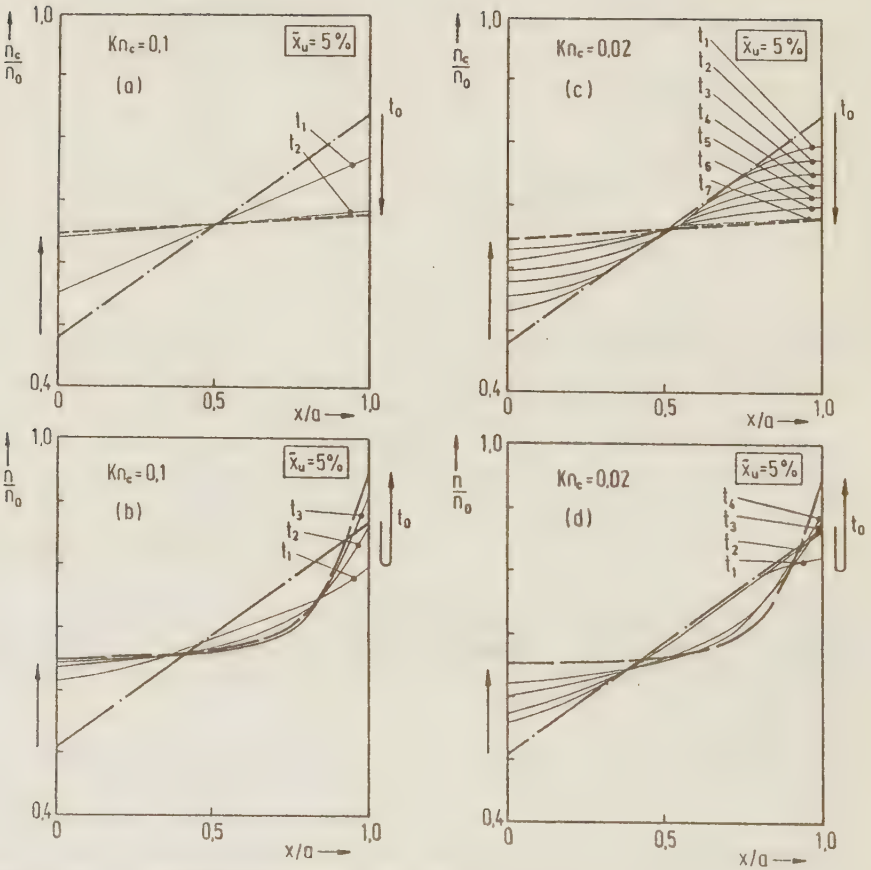


Abb. 4.4. Zeitlicher Ablauf der Einstellung des Trägergas- (a und c) und des Gemischdichte- (b und d) Profils für die Knudsenzahlen $Kn_c=0,1$ (a und b) und $Kn_c=0,02$ (c und d). Eintrittsdichteprofil nach Abb. 4.3.
(Abweichung vom Standardfall: Vollständige eindimensionale Simulation, gerader Kanal, $\bar{x}_u = 5\%$)

sprechend mit 24 Zeitschritten der Bewegung Δt_m gleich einem Umlenkwinkel von 15° ab.¹ Wegen der größeren Anzahl der Stöße auch mit den trägeren Isotopen dauert für $Kn_C = 0,02$ der Einstellvorgang 84 Zeitschritte der Bewegung, entsprechend $\phi = 65^\circ$.

Das Gesamtdichteprofil (b und d) nimmt an der Umlenkwand entsprechend der Trägergasdichteverchiebung bei kleinen Zeiten zuerst ab, um danach mit zunehmender Diffusion der Isotope zur Umlenkwand in Richtung Gleichgewichtsprofil anzusteigen. Dieser Umkehrprozeß verläuft für die große Knudsenzahl wegen der geringen Anzahl der Stöße ausgeprägter.

Die Isotopentrennung beginnt wegen der unterschiedlichen Hemmung durch die Stöße mit dem Trägergas für $Kn_C = 0,02$ sofort. Das Überspringen des Trenneffekts über den Gleichgewichtswert ist nicht so ausgeprägt wie bei der Spurenkonzentration der Isotope (vergleiche Abb. 4.1), da die Stöße der Isotope untereinander, wie in Kapitel 4.1.1. gezeigt, besonders bei kleinen Knudsenzahlen zu einer Rückmischung führen. Deshalb zeigt sich der Einfluß der Bewegung des Trägergases bei $\tilde{x}_u = 5\%$ für $Kn_C = 0,1$ deutlicher. In Abb. 4.5 wurde zum Vergleich der Verlauf des Trenneffekts bei festgehaltenem Trägergasdichteprofil (Tracer-MC-Simulation) für $Kn_C = 0,1$ mit eingezeichnet.²

In der Untersuchung von Berkahn /23/S. 32 zum Einfluß der Struktur des Geschwindigkeitsfeldes auf die Isotopentrennung wird festgestellt, daß die Trennung der Isotope umso größer wird, je weiter

¹ Die Berechnung der makroskopischen Feldgrößen entspricht einem Integralmittelwert von der Anfangszeit bis zur Endzeit. Der Trenneffekt wird bei dem der Mitte des Zeitintervalls entsprechenden Umlenkwinkel aufgetragen. Zeitschritt der Bewegung $\Delta t_m = 0,45$.

² Dabei muß beachtet werden, daß die Dichteverteilung des Trägergases bei der Tracersimulation mit $\tilde{x}_u = 5\%$ dem Profil $(n_c/n_0)^e$ in Abb. 4.3 entspricht und somit die Dichte an der Umlenkwand gegenüber dem Gleichgewichtswert erhöht ist und die Isotopentrennung begünstigt.

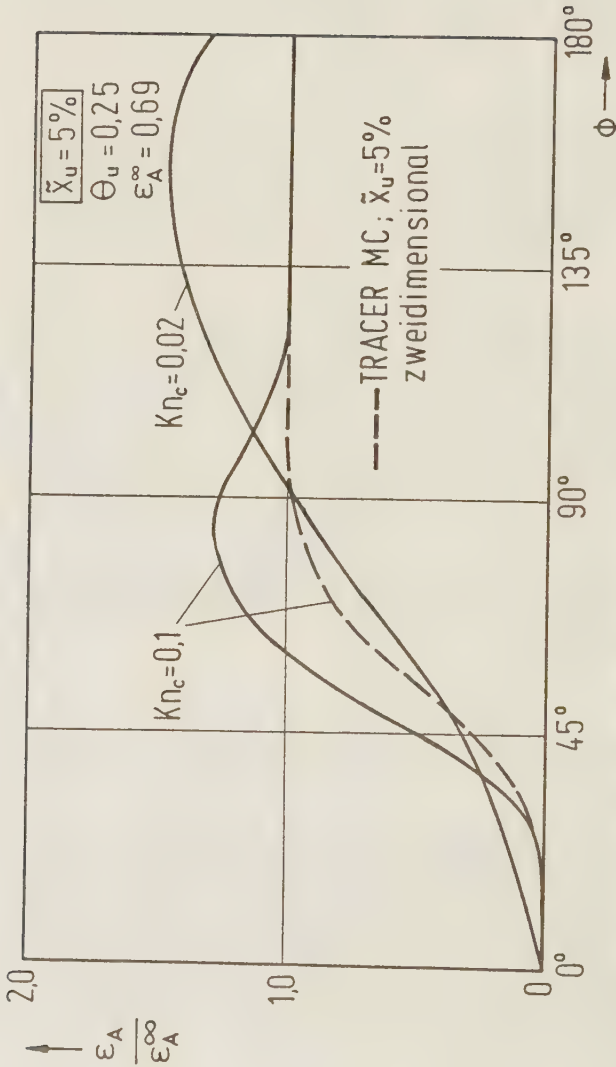


Abb. 4.5. Überspringen der mit der eindimensionalen vollständigen MC-Simulation berechneten Trenneffekte über den Gleichgewichtswert ϵ_A^∞ für die Isotopenkonzentration $\bar{x}_u = 5\%$ bei unterschiedlichen Knudsenzahlen und für $Kn_C = 0,1$ im Vergleich zur zweidimensionalen Tracer MC-Simulation.
 (Abweichung vom Standardfall: Vollständige eindimensionale Simulation, gerader Kanal, $\bar{x}_u = 5\%$)

der radiale Diffusionsweg der Molstromfläche $r_{\theta}^{\infty} - r_{\theta}^e$ für $\theta_u = \text{konst}$ ausgedehnt wird und je mehr die Isotope am Eintritt der Düse an der Innenwand konzentriert sind. Führt man das Gemisch nicht entsprechend der Dichteverteilung nach Gl. (4.6) mit der mittleren Masse ein, sondern verteilt das Gemisch mit konstanter Dichte über den Radius am Eintritt, so läßt sich der Einfluß der Anfangsdichteverteilung auf die Isotopentrennung bei der gleichzeitigen Bewegung des Trägergases studieren.

Die Wirkung des Kraftfeldes bleibt erhalten, da das Geschwindigkeitsprofil nicht geändert wird, somit unterliegen die Moleküle am Eintritt sofort der Diffusionswirkung des anstehenden Druckgradienten und das Gasgemisch versucht sich entsprechend Gl. (4.6) mit m nach (4.1) einzustellen. Für das Trägergas wird dieser Vorgang in Abbildung 4.6 für beide Knudsenzahlen deutlich. Er läuft praktisch mit der Schallgeschwindigkeit des Gemisches ab. Daraus errechnet sich die Einstellzeit

$$t_{n_c} = \frac{a/2}{v_y/M(x/a=0,5)} \sim t_1 ,$$

sie entspricht etwa einem Zeitabschnitt $t_1 - t_0$ gleich zwölf Zeitschritten der Bewegung Δt_m . Für kleine Knudsenzahl $Kn_c = 0,02$ dauert es etwas länger, der Umkehrpunkt der Bewegungsrichtung ist bei t_2 erreicht (Abb. 4.6c). Die Gesamtdichteprofile folgen wie im vorangegangenen Fall zuerst der Trägergasdichteverteilung, bis an der Umlenk wand der Einfluß der Isotope überwiegt (Abb. 4.6b und d).

Wie stellt sich der Einfluß der Bewegung des Trägergases im Fall $(n/n_0)^e = \text{konstant}$ auf die Isotopentrennung dar?

Bei kleiner Anzahl von Stößen zwischen Trägergas und Isotopen ($Kn_c = 0,1$) sind für das Auftreten der Isotopentrennung die Stöße mit der diffus reflektierenden Wand maßgebend (Kap. 3.3 Abb. 3.15). Durch die gemeinsame Strömung zur Umlenk wand von Trägergas und Isotopen wird für einen Zeitabschnitt kleiner t_1 die Bewegung der Isotope zur Umlenk wand unterstützt. Die Trennwirkung auf Grund der

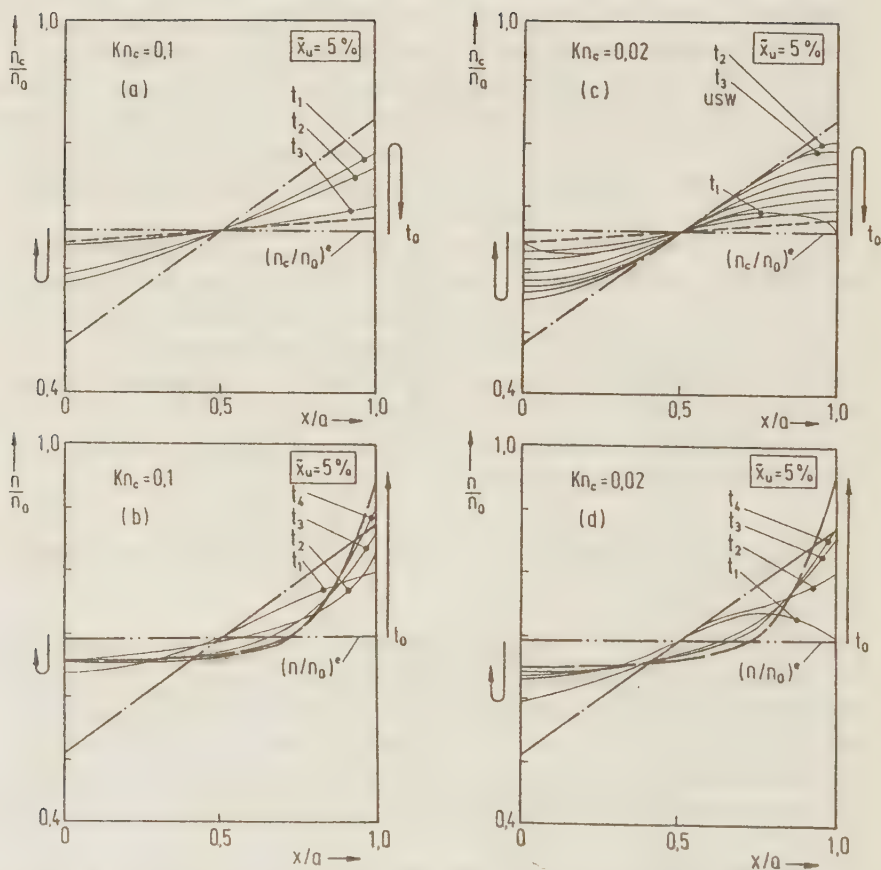


Abb. 4.6. Zeitlicher Ablauf der Einstellung des Trägergas- (a und c) und des Gemischdichte- (b und d) Profils für die Knudsenzahlen $Kn_c=0,1$ (a und b) und $Kn_c=0,02$ (c und d) mit gleichverteilten Eintrittsdichteprofilen.
(Abweichung vom Standardfall: Vollständige eindimensionale Simulation, gerader Kanal, $\bar{x}_u = 5\%$)

Wandreflexion kann eher zum Tragen kommen als im Fall $(n/n_0)^e \neq \text{konstant}$. Die anschließende Rückströmung des Trägergases führt dann auch im Fall $(n/n)^e = \text{konstant}$ zum Überschwingen über den Gleichgewichtstrenneffekt ϵ_A^∞ , wie in Abb. 4.7 für $Kn_C = 0,1$ gezeigt wird. Für kleine Knudsenzahlen läuft die Isotopentrennung wie gesehen schon allein wegen der unterschiedlichen Hemmung der Isotope bei der Diffusion durch das Trägergas bei kleineren Umlenk winkeln an. Strömen Isotope und Trägergas für $(n/n)^e = \text{konstant}$ gemeinsam bis $t = t_2$ in gleiche Richtung, so wird dieser Trennmechanismus bis zu diesem Zeitpunkt außer Kraft gesetzt, erst danach beginnt die Rückdiffusion des Trägergases und eine merkliche Trennung setzt ein; dieses Nachlaufen der Isotopentrennung bei konstanter Eintrittsdichtevert eilung wird bei $Kn_C = 0,02$ bis zu Erreichen des Maximums nicht mehr eingeholt (Abb. 4.7).

So führen die unterschiedlichen Trennmechanismen für eine freie Molekularströmung mit Stößen an diffus reflektierender Wand und für eine Strömung im Übergangsgebiet zu der Tatsache, daß trotz anfänglicher gemeinsamer radialer Bewegung von Isotopen und Trägergas bei vorgegebener konstanter Eintrittsdichtevert eilung für große Knudsenzahlen die Isotopentrennung eher auftritt als bei Vorgabe einer nicht konstanten Dichtevert eilung, während das für kleinere Knudsenzahlen nicht der Fall ist.

Ein Einfluß der Bewegung des Trägergases am Eintritt der Düse auf den Maximalwert der Trennung konnte mit den Modellrechnungen nicht nachgewiesen werden. Daraus läßt sich ableiten, daß die Eintrittsdichtevert eilung des eintretenden ternären Gasgemisches unter den herrschenden Bedingungen nur für die Lage des Maximalwertes, d.h. für die Lage des Umlenk winkels $\phi_{\epsilon A \max}$ und damit für den optimalen Einlaßdruck bei entsprechend großer Isotopenkonzentration ($\tilde{x}_u = 5 \%$) von Bedeutung ist.

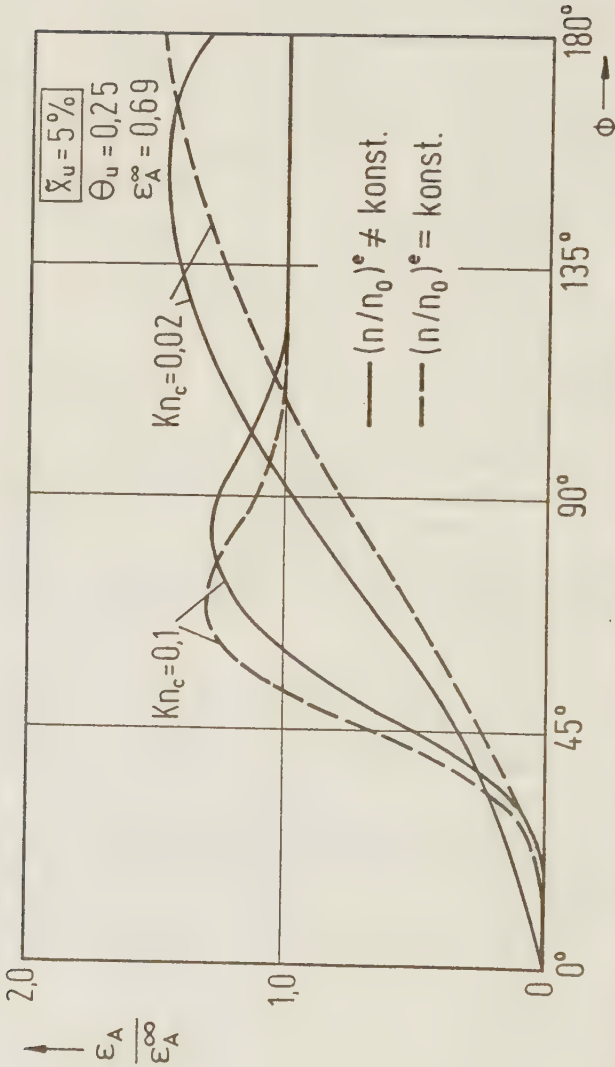


Abb. 4.7. Die Wirkung der Einstellung des Trägergasdichteprofiles in Richtung Gleichgewichtsverteilung ausgehend von der variablen ($\neq$ konstant) und gleichverteilten (= konstant) Eintrittsdichteverteilung $(n/n_0)^e$ auf die Isotopentrennung bei unterschiedlichen Knudsenzahlen.
(Abweichung vom Standardfall: Vollständige eindimensionale Simulation, gerader Kanal, $\bar{x}_u = 5\%$)

Einen Vergleich der zeitlichen Entwicklung am Düsen Eintritt der Gemischtrennfaktorprofile $\ln A_G$ und der Radien der Molstromflächen mit konstantem Isotopengemischabschälverhältnis x/a ($\theta_u = 0,25$) für die Eintrittsbedingungen der Dichte $(n/n_0)^e \neq \text{konstant}$ und $(n/n_0)^e = \text{konstant}$ zu Beginn der Umlenkung zeigt Abb. 4.8. Bei Gleichverteilung der Moleküle über den Querschnitt strömen Isotope und Trägergas zuerst in gemeinsamer Richtung, eine Gemischtrennung erfolgt lediglich längs der Innenwand $x/a \rightarrow 0$ und in dem von den Wandstößen beeinflussten Bereich an der Umlenk wand $x/a \rightarrow 1$. Wegen der fehlenden ausgleichenden Stöße bei großer Knudsenzahl ($Kn_C = 0,1$; Abb. 4.8a) wächst die Gemischtrennung mit zunehmender Umlenkung schnell, aber der Unterschied in der Vorgabe der Dichteverteilung kann nur langsam ausgeglichen werden. Eine kleine Knudsenzahl führt andererseits zu einer langsameren Ausbildung der Gemischtrennprofile, aber zu einem Ausgleichen der $\ln A_G$ -Werte der unterschiedlichen Eintrittsdichteverteilungen im betrachteten Radialbereich der Verschiebung der Molstromflächen nach wenigen Zeitschritten ($Kn_C = 0,02$; Abb. 4.8b). Erst ab $t = t_4$ gelangt die Molstromfläche x/a ($\theta_u = 0,25$) für $Kn_C = 0,1$ in den Wand einflußbereich (Anstieg von $\ln A_G$ für große x/a) und in Abb. 4.7 wird die Isotopentrennung für konstantes $\theta_u = 0,25$ sichtbar. Die Verschiebung der Molstromfläche $\theta_u = 0,25$ für $Kn_C = 0,02$ läuft so langsam ab, daß der Wand einflußbereich zu Beginn der Umlenkung nie erreicht wird (Abb. 4.8b).

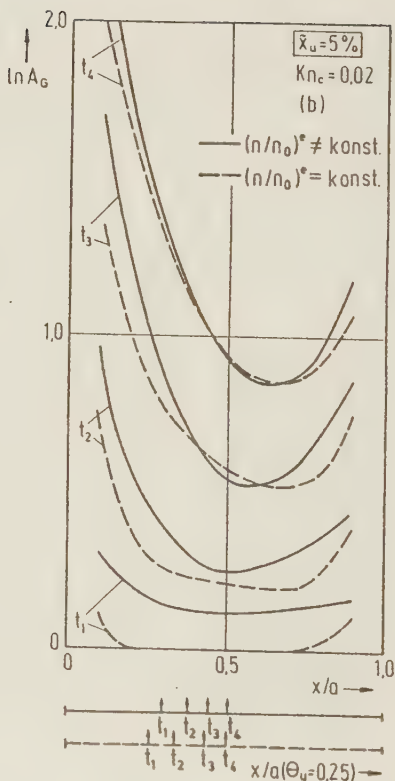
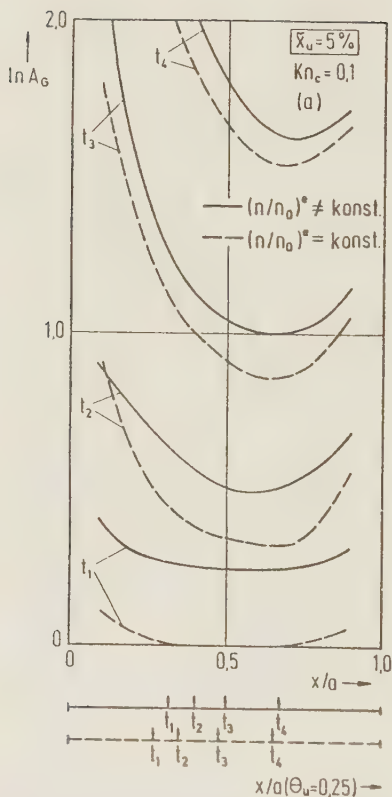


Abb. 4.8. Zeitliche Entwicklung der Gemischtrennung $\ln A_G$ für variable und konstante Eintrittsdichteverteilung bei $Kn_C = 0,1$ (a) und $Kn_C = 0,02$ (b) und Änderung des Radius der Molstromfläche für konstantes Abschälverhältnis x/a ($\Theta_u = 0,25$) als Funktion der Abstandskoordinate x/a .

(Abweichung vom Standardfall: Vollständige eindimensionale Simulation, $\bar{x}_u = 5\%$)

4.2. Massendifferenz der Isotope

Um die Streuung des berechneten Trenneffekts bei der MC-Simulation bei gegebener Rechenzeit zu verkleinern, wurde die Differenz der relativen Molekülmassen zwischen den Isotopen auf $\Delta\tilde{m} = 100$ erhöht (Kap. 3.3). Durch Variation der Massendifferenz bei gleicher Knudsenzahl und mittlerer relativer Molekülmasse des Isotopengemisches wird eine Extrapolation der Einflüsse der Nichtgleichgewichtseffekte auf die Isotopentrennung bei kleineren Massendifferenzen möglich. Dabei ist zu beachten, daß wegen des größeren Fehlers für die Berechnungen mit kleiner Massendifferenz bei gleicher Probengröße aufgrund des kleineren Trenneffekts, was hier am Beispiel des Gleichgewichtswertes ϵ_A^∞ in Tabelle 4.1 verdeutlicht wird, mit einer größeren Probengröße für die kleinere Massendifferenz gerechnet werden muß.

In Tabelle 4.1 sind die Ergebnisse der Variation der Massendifferenz bei festgehaltener mittlerer Isotopenmasse $\tilde{m}_u = 350$ gegeben. Wegen der identischen mittleren relativen Isotopenmasse bleiben die maximalen Nichtgleichgewichte zwischen Isotopengemisch und Trägergas $v_{urmax} - v_{cr}$ und $T_{urmax} - T_c$ gleich. Für den betrachteten Bereich der Massendifferenz der Isotope von $\Delta\tilde{m} = 50$ bis 150 bleibt die maximale Machzahl der radialen Isotopengemischdiffusion nach Gleichung (4.8) mit $T_{ur} = T_c$ (siehe Abb. 3.6; $T'_{ur} = 0,7874$ für $r/a < 0,9$)

$$M_{urmax} = \frac{v_{urmax}}{\sqrt{\frac{\gamma k T_{ur}}{m_u}}} \quad (4.8)$$

wie erwartet mit $M_{urmax} = 5,1$ erhalten. Aufgrund der Massenabhängigkeit der Geschwindigkeitsverhältnisse der Isotope wächst das Nichtgleichgewicht zwischen den Isotopen (h-l) für steigende Massendifferenz der Isotope sowohl in der Geschwindigkeit ($v_{hr} - v_{lr}$)_{max} als auch in der Temperatur ($T_{hr} - T_{lr}$)_{max} (Tabelle 4.1). Nach Abb. 4.9a erfolgt eine Zunahme der relativen Nichtgleichgewichte

Tabelle 4.1: Einfluß der Differenz der relativen Molekülmassen der Isotope auf die Nichtgleichgewichte und die Isotopentrennung bei $Kn_C = 0,1$ für Tracer-Simulation

$\Delta \tilde{m}$	$v'_{ur \max}$	$T'_{ur \max}$	$(v'_{hr} - v'_{lr})_{\max}$	$(T'_{hr} - T'_{lr})_{\max}$	$(\varepsilon_A / \varepsilon_A^\infty)_{\max}$ $\phi_{\varepsilon_{A \max}} = 60^\circ$	ε_A^∞
50	0,317	9,05	0,0457	2,8	1,58	0,303
100	0,315	9,10	0,090	5,8	1,32	0,699
150	0,315	9,5	0,14	7,0	1,34	1,221

der Differenz der Radialgeschwindigkeiten $(v_h - v_l)_r/v_{ur}$ bei einer Vergrößerung der Massendifferenz um den Faktor 3 um 300 % bezogen auf den Wert bei $\Delta\tilde{m} = 50$. Dieser lineare Zusammenhang zwischen Diffusionsgeschwindigkeitsdifferenz und der Massendifferenz der Isotope besteht auch nach der kontinuumsmäßigen Beschreibung des Diffusionsvorgangs, z.B. mit Gleichung (3.14). Die auf die Isotopengemischtemperatur bezogene Differenz der radialen Isotopentemperaturen steigt nach Abb. 4.9b im gleichen Massendifferenzbereich nur um 100 %.

Der Anstieg der Nichtgleichgewichte der Isotope führt entsprechend den Zusammenhängen in Kapitel 3.3 zu einer Abnahme des maximalen Überschwingens des normierten Trenneffekts $\epsilon_{Amax}/\epsilon_A^\infty$. Bei einer Steigerung von $\Delta\tilde{m} = 100$ zu $\Delta\tilde{m} = 150$ ist das aber, wie man der Tabelle 4.1 entnehmen kann $[(\epsilon_A/\epsilon_A^\infty)_{max} \sim 1,3]$ nicht der Fall. Der Entmischungsprozeß der Isotope im ternären Gemisch läßt sich nicht einfach beschreiben. Eine Interpretationshilfe bieten Relaxationszeiten einzelner Prozesse. Die Relaxationszeit gibt die Zeit an, bis zu der ein Nichtgleichgewicht auf den e^{-1} -ten Wert abgeklungen ist.

Das Überschwingen des Trenneffekts über den Gleichgewichtswert wird bei verhinderter Gemischtrennung vergrößert /4/, da in diesem Fall die unterschiedliche Diffusionshemmung des Trägergases länger aufrecht erhalten bleibt. Das heißt, die zeitliche Änderung der Differenz der Trägergas- und Isotopengemischgeschwindigkeit soll möglichst groß sein, was gleichbedeutend mit der Aussage ist, daß die Relaxationszeit für diesen Prozeß klein wird, da Störungen dann schnell ausgeglichen werden. Um ein hohes Überschwingen des Trenneffekts zu verwirklichen, muß außerdem die Differenz der Isotopengeschwindigkeiten möglichst groß sein und lange erhalten bleiben, das heißt, die Relaxationszeit zum Ausgleich von Geschwindigkeitsdifferenzen der Isotope muß groß werden. Nach einer Arbeit von Hamel /33/ werden durch die veränderte Massendifferenz nur die binären Relaxationszeiten für die Stöße zwischen den Isotopen und dem Trägergas beeinflusst; da $m_l = m_u - \Delta m/2$ und $m_h = m_u + \Delta m/2$ für $\tilde{x}_l/\tilde{x}_h = 1$ ist,

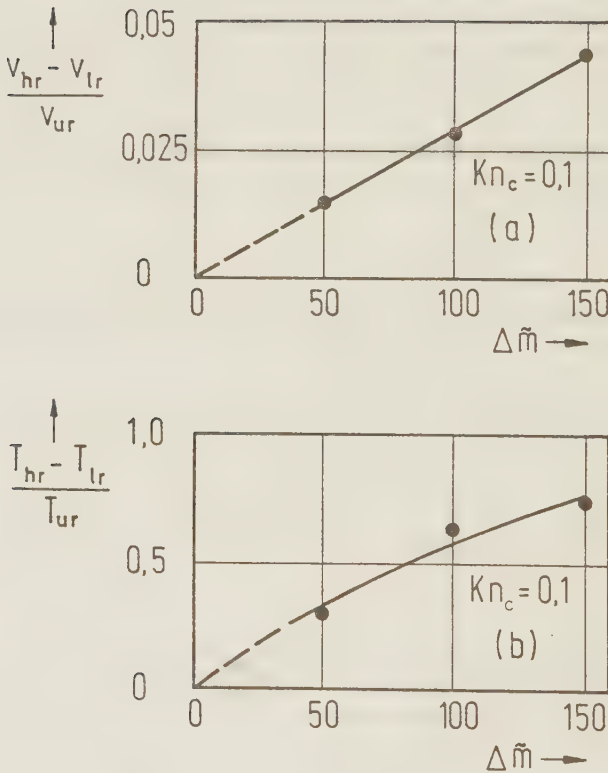


Abb. 4.9. Abhängigkeit der radialen, auf die Isotopengemischdaten bezogenen Geschwindigkeits- (a) und Temperaturabweichungen (b) zwischen den Isotopen von der Differenz der relativen Molekülmassen $\Delta \tilde{m}$.

(Abweichung vom Standardfall: $\Delta \tilde{m} = 50, 150$)

folgt für den Einfluß auf die binären Relaxationszeiten im Mehrkomponentengemisch nach Gleichung (4.9)

$$\tau_{ij} = \frac{1}{\mu_{ji} v_{ij}} \quad (4.9)$$

mit $\mu_{ji} = m_j / (m_i + m_j)$ und $\mu_{ii} = 1$

nur eine Änderung für die Kombinationen l - c ($\mu_{cl} \sim m_c / m_l$) und h - c ($\mu_{ch} \sim m_c / m_h$), die anderen Kombinationen ergeben $\mu_{ji} \sim 1$.

Die Auswirkungen der Änderung der binären Relaxationszeiten auf die Relaxationsgleichungen der Geschwindigkeitsdifferenzen zwischen Trägergas und Isotopen ($v_c - v_h$) und innerhalb der Isotope ($v_l - v_h$) sind für die ternären Relaxationsprozesse der MC-Simulations-Modelle im Anhang I berechnet und dargestellt. Dabei zeigt sich, daß einerseits das Verhältnis der Relaxationszeiten der Isotopentrennung zur Gemischtrennung mit steigender Massendifferenz geringfügig vermindert wird, was bedeutet, daß das Überschwingen des Trenneffekts sich verringert. Andererseits nimmt die zeitliche Änderung der Differenz der Isotopengeschwindigkeiten mit steigender Massendifferenz ab ($\tau(v_l - v_h) / \tau(\Delta \tilde{m})$ wächst nach Abb. AI2). Die Isotopentrennung läuft dann langsamer ab und der Trenneffekt steigt mit wachsender Massendifferenz. Wegen der Überlagerung zweier gegenläufiger Prozesse unterscheiden sich die auf den Gleichgewichtswert bezogenen maximalen Trenneffekte für $\Delta \tilde{m} = 100$ und $\Delta \tilde{m} = 150$ nur geringfügig.

4.3 Konzentrationsverhältnis der Isotope

Bei den bisherigen Modellberechnungen wurde, um den Fehler bei der Berechnung des Trenneffekts aus den Abschälverhältnissen der Isotope klein zu halten, mit einer Gleichverteilung der Isotope im Isotopengemisch $\tilde{x}_h = \tilde{x}_l$ gerechnet /9/, somit sind auch die Gewichtungsfaktoren der Simulation entsprechend den Konzentrationen gleich groß. Verschiebt man das Verhältnis der Uranisotopenkonzentration in Richtung zur natürlichen Verteilung des Uranisotops U^{235} im Natururan von $\tilde{x}_l = 0,007 \cdot \tilde{x}_u$ und setzt $\tilde{x}_l = 0,1 \cdot 10^{-2} \cdot \tilde{x}_h \ll \tilde{x}_h$, so verschieben sich die Massen- und Geschwindigkeitsverhältnisse wie in Tabelle 4.2 für $\Delta\tilde{m} = 50$ gezeigt. Die kleine Massendifferenz wurde gewählt, um das Geschwindigkeitsverhältnis des leichten Isotops hoch zu halten, da bei natürlicher Konzentrationsverteilung die mittlere Masse des Gemisches nahezu der Masse des schweren Isotops entspricht und die Trennung stark vom Geschwindigkeitsverhältnis abhängt. Somit wird für $\Delta\tilde{m} = 50$ die Gemischtrennung von der Verteilung der Isotope im Isotopengemisch nicht wesentlich beeinflusst, was durch den Vergleich der Abschälverhältnisse des Isotopengemischs θ_u z.B. für den Umlenkwinkel $\phi = \phi^+$ und den Radius $r/a=0,97$ bestätigt wird $\theta_u(\tilde{x}_l = \tilde{x}_h) = 0,5929$ und $\theta_u(\tilde{x}_l \ll \tilde{x}_h) = 0,5994$.

Die Isotopentrennung weist dagegen Unterschiede auf. Wegen der abweichenden Geschwindigkeitsverhältnisse (Tab. 4.2) sind die Molstromflächen für $\tilde{x}_l/\tilde{x}_h = 1$ des schweren Isotops näher an der Umlenk wand konzentriert. Das leichte Isotop wird wegen der geringen Masse im Falle $\tilde{x}_l/\tilde{x}_h \ll 1$ vom Trägergas stärker an der Diffusion gehindert und die wesentliche Differenz der Abschälverhältnisse der Isotope ist an der Stelle $\phi = \phi^+$ größer, so daß die Isotopentrennung eher einsetzt und das Maximum des Überschwingens verbreitert wird. Das Maximum selbst erhebt sich für $\tilde{x}_l/\tilde{x}_h = 1$ geringfügig höher als für $\tilde{x}_l/\tilde{x}_h \ll 1$ (Abb. 4.10), weil für eine konstante Massendifferenz der Isotope die Isotopentrennung beim Übergang auf ein größeres Konzentrationsverhältnis $\tilde{x}_l/\tilde{x}_h$ länger aufrecht erhalten wird (Diesen Sachverhalt entnimmt man auch Anhang I Abb. A12. Das Verhältnis $\tau(v_l - v_h)/\tau(v_c - v_h)$ vergrößert sich beim Übergang von $\tilde{x}_l \ll \tilde{x}_h$ in Richtung $\tilde{x}_l/\tilde{x}_h = 1$). Der geringfügig langsamere Ausgleich der Geschwindigkeitsdifferenz zwischen Isotopengemisch und Trägergas,

Tabelle 4.2: Einfluß der Isotopenverteilung $\tilde{x}_1/\tilde{x}_h$ im Isotopengemisch. Geschwindigkeits- und Massenverhältnisse für $\Delta\tilde{m} = 50$ und $\tilde{x}_u = 5 \cdot 10^{-2} \%$

	$\tilde{x}_1 = \tilde{x}_h$		$\tilde{x}_1 \ll \tilde{x}_h$	
Komponente	S_i	$\tilde{m}_i/\tilde{m}_C$	S_i	$\tilde{m}_i/\tilde{m}_C$
c	0,788	1	0,788	1
l	10,042	162,5	9,649	150
h	10,787	187,5	10,422	175

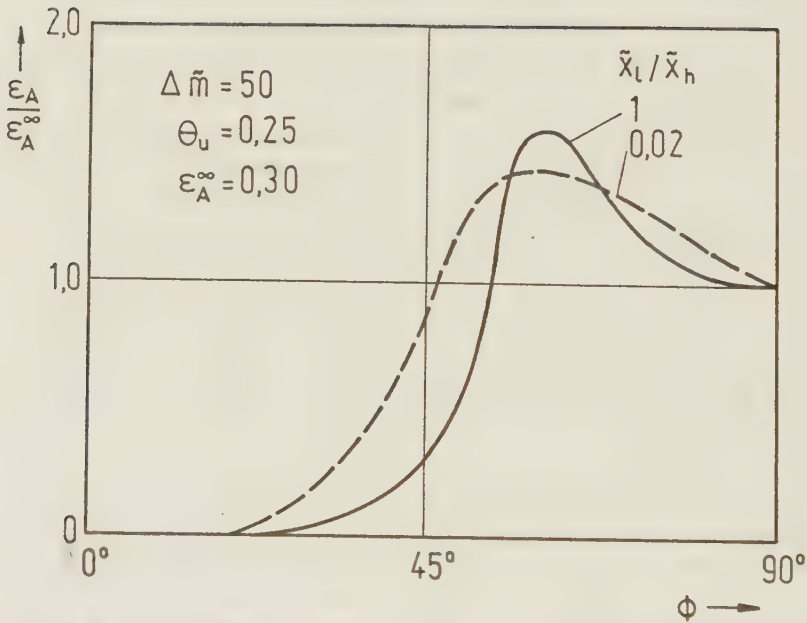


Abb. 4.10. Einfluß der Änderung der Verteilung der Isotope im Isotopengemisch $\tilde{x}_l/\tilde{x}_h$ in Richtung zur natürlichen Uranverteilung $\tilde{x}_l/\tilde{x}_h \ll 1$ auf die Trennung der Isotope für eine Differenz der relativen Isotopenmassen von $\Delta \tilde{m} = 50$ und konstantes Isotopengemischabschälverhältnis θ_u .
 (Abweichung vom Standardfall: $\Delta \tilde{m} = 50$, $\tilde{x}_l/\tilde{x}_h = 0,02$)

also die verbesserte Möglichkeit der Gemischtrennung mit zunehmendem Verhältnis $\tilde{x}_1/\tilde{x}_h$ wirkt sich negativ auf das Überschwingen des Trenneffekts aus. Dieser Effekt bleibt jedoch ohne wesentlichen Einfluß (Nach Anhang I ist $\tau(v_c - v_h)/\tau(\tilde{x}_1/\tilde{x}_h)$ immer klein gegen $\tau(v_1 - v_h)/\tau(v_c - v_h)$).

4.4 Wandreflexion

Der herausragende Einfluß der Wand bei großen Knudsenzahlen im Eintrittsbereich der Trenndüse auf den Trenneffekt legt es nahe, den Einfluß der Reflexionsbedingungen an der Wand zu untersuchen.

Bei der diffusen Reflexion wird der Energieaustausch mit der Umlenkwand zugelassen. Stößt ein Molekül die Wand, wird es mit einer zufälligen Richtung zwischen 0 und 2π reflektiert, d.h. in Umfangsrichtung entsprechend der aus einer Maxwellverteilung gewählten Komponente, der die Wandgeschwindigkeit überlagert ist, und in Radialrichtung mit einer aus einer Halbraumverteilung gewählten Komponente.

Bei spiegelnder Reflexion entsprechen sowohl der Betrag des Geschwindigkeitsvektors sowie der Betrag des Stoßwinkels zwischen Umlenkwand und Vektor dem Wert vor dem Wandstoß, nur die Radialkomponente der Geschwindigkeit wechselt ihr Vorzeichen. Ein Energieaustausch mit der Umgebung ist über Wandstöße nicht möglich. Das führt beim Stoß eines Moleküls mit der Wand zur Thermalisierung der kinetischen Energie. Da die mittlere Geschwindigkeit der zur Wand fliegenden Moleküle $\bar{v}_r^+$ gleich zur mittleren Geschwindigkeit der reflektierten Moleküle $\bar{v}_r^-$ ist, also im Mittel an der Wand $\bar{v}_r = 0$ wird, läßt sich die größte Isotopentemperatur in Radialrichtung bei freier Molekularströmung am Anlaufwinkel ϕ^+ nach Gl. (4.10) errechnen:

$$T_{ur}^f = \frac{m_u}{k} (v_{rmax,lim})^2 \quad (4.10)$$

mit $v_{rmax,lim}$ aus der Vektorzerlegung des Eintrittsgeschwindigkeitsvektors am Winkel ϕ^+ , der nach Gleichung (3.7) nur vom Verhältnis $a/(R_{in}+a)$ abhängt, folgt

$$T_{ur}^f = \frac{m_u}{k} [\omega R_{in} \cdot \sin \arccos(1 - \frac{a}{r + R_{in}})]^2 \quad (4.11)$$

In der Nähe der Umlenkwand wird $T_{ur} < T_{ur}^f$ für $Kn_c < \infty$. Da keine

Energie abgeführt werden kann, bedingt die Thermalisierung einen Temperatursprung an der Umlenk wand, der mit abnehmender Knudsenzahl kleiner wird, da bei kleiner Knudsenzahl eine Verteilung der Energie über die Stöße mit dem Trägergas möglich ist. Außerdem wird durch Stöße der Isotope untereinander die Energie in alle Richtungen verteilt, was an dem Anstieg der Temperatur in z-Richtung abgelesen werden kann. Vergleicht man in Tabelle 4.3 die angegebenen Temperaturen für die Reflexionsbedingung der diffusen Wand mit den Temperaturen für spiegelnde Reflexion am gleichen Umlenkwinkel ϕ^+ für zwei Radien nahe der Umlenk wand und weiter von ihr entfernt, so zeigen sich für die diffuse Reflexion klar ausgebildete Temperaturgradienten $\partial T_r / \partial r$ und $\partial T_\phi / \partial r$, während bei spiegelnder Reflexion nur in Radialrichtung ein geringer Gradient $\partial T_r / \partial r$ zu erkennen ist. Dies gilt für den gesamten dargestellten Knudsenzahlbereich. Beim Umlenkwinkel von 90° herrscht bei diffuser Reflexion Gleichgewicht, während das Ungleichgewicht bei spiegelnder Reflexion für alle Knudsenzahlen vorhanden bleibt. Es ist geringer, weil z.B. die radiale Geschwindigkeitskomponente der die Wand treffenden Moleküle im Mittel geringer ist (siehe auch Abb. 3.8).

Eine Trennung der Isotope kann bei freier Molekularströmung und spiegelnder Wand nicht erfolgen. Je kleiner die Knudsenzahl ist, desto wirkungsvoller passen die Stöße mit dem Trägergasfeld die Molstromflächen der Isotope der Stromlinienkrümmung des Trägergases an. In Abb. 4.11 sind der Anschaulichkeit halber für $\theta = 0,5$ die Molstromflächen für unterschiedliche Knudsenzahlen dargestellt. Für $Kn_c = 0,02$ genügt allein die unterschiedliche Hemmung des Trägergases für die Diffusion des leichten und schweren Isotops im Anlaufbereich $\phi < \phi^+$ die Trennung aufzubauen (Abb. 4.12). Die Größe des Trenneffektes ist mit der Trennung bei diffuser Reflexion und gleicher Knudsenzahl vergleichbar. Das Überspringen verringert sich, da die schweren Komponenten wegen der spiegelnden Reflexion wieder von der Wand abgedrängt werden und eine periodische Rückvermischung stattfindet, die für große Umlenkwinkel immer mehr ausgeglichen wird. Die periodischen Schwankungen in der Anzahl der Wandstöße spiegeln sich in den periodischen Schwan-

Tabelle 4.3: Isotopengemischtemperatur bei spiegelnder Wandreflexion

Reflexionsbedingung			spiegelnd			diffus mit bewegter Wand
Knudsenzahl Kn_c			$\rightarrow \infty$	0,1	0,02	0,1
Umlenkwinkel ϕ	Radius r/a	Richtung q	Temperatur in Richtung q T_{uq}/T_0			
45° ($\phi \sim \phi^\dagger$)	0,958	r	31,25	19,93	3,02	9,13
		ϕ	10,71	5,01	0,93	5,32
		z	0,79	1,16	0,87	0,76
	0,996	r	25,31	11,82	2,31	1,52
		ϕ	10,94	5,23	0,99	1,26
		z	0,78	1,21	0,89	0,79
90°	0,958	r	15,97	6,26	2,46	0,74
		ϕ	2,53	1,81	1,09	0,79
		z	0,78	1,24	0,81	0,73
	0,996	r	12,95	6,03	1,42	0,79
		ϕ	2,46	1,78	0,86	0,79
		z	0,74	1,20	0,82	0,80

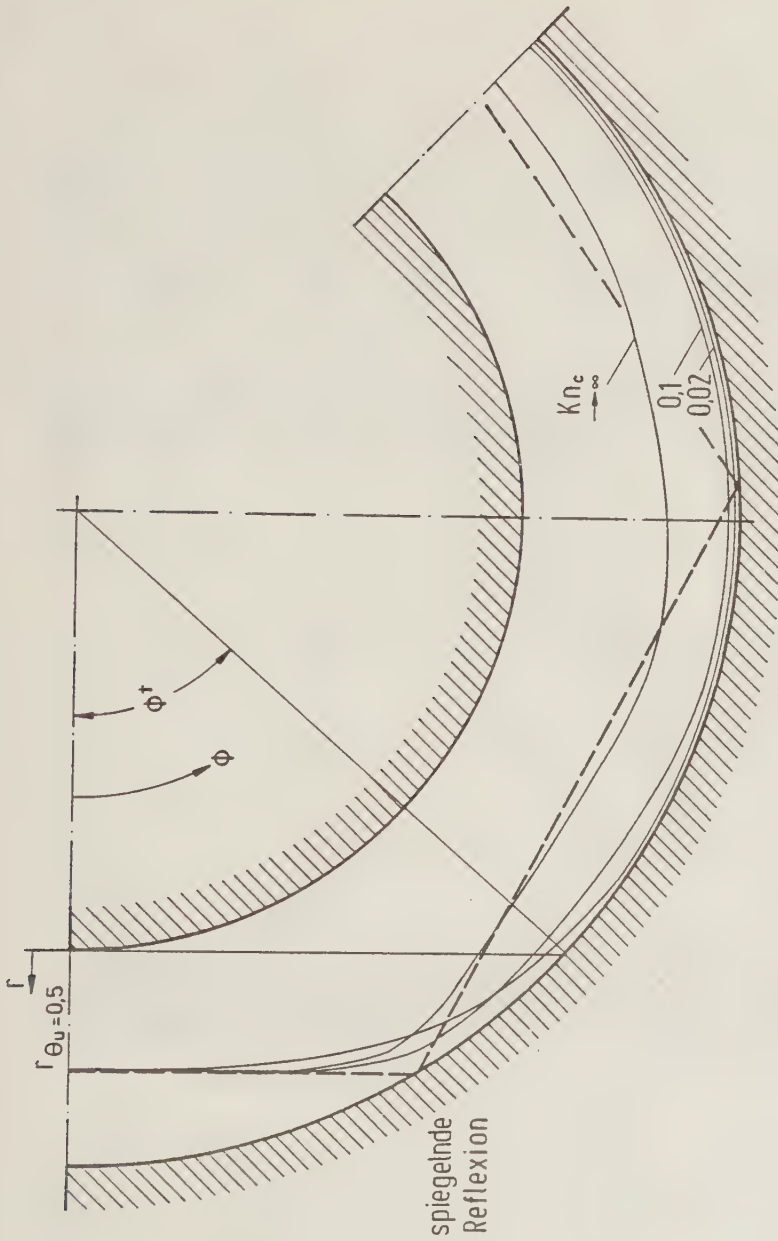


Abb. 4.11. Lage der Molstromflächen für konstantes Isotopengemisch-
abschälverhältnis $\theta_0 = 0,5$ und verschiedene Knudsenzahlen bei spie-
gelnder Wandreflexion (unbeeinflusster Trajektor ---).
(Abweichung vom Standardfall: spiegelnde Reflexion)

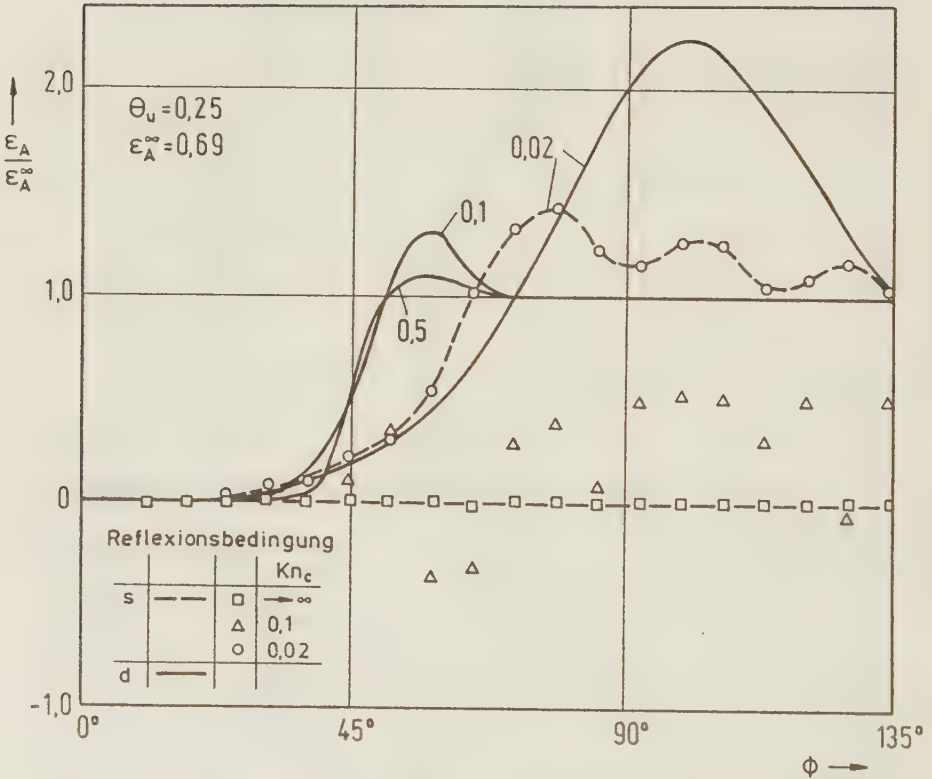


Abb. 4.12. Berechneter auf den Gleichgewichtswert ϵ_A^∞ normierter Trenneffekt bei konstantem Isotopengemischabschälverhältnis θ_u als Funktion des Umlenk winkels ϕ für spiegelnde (--- und offene Symbole) und diffuse (—) Reflexionsbedingung an der Wand bei Variation der Knudsenzahl.
(Abweichung vom Standardfall: spiegelnde Reflexion)

kungen des Trenneffekts wieder.

Für größere Knudsenzahlen bringen die Stöße mit dem Trägergas keine kontinuierliche Krümmung der Molstromfläche bei endlichen Umlenkwinkeln zustande, und der Trenneffekt schwankt um den Ausgangswert $\epsilon_A = 0$.

Zusammenfassend läßt sich ableiten, daß bei kleiner Knudsenzahl im Anlaufbereich die Wandreflexion von untergeordneter Wichtigkeit für die Isotopentrennung ist. Zum Erreichen eines großen Maximalwertes des Überschwingens wird die diffuse Reflexion benötigt, ebenso wie bei großen Knudsenzahlen, wo eine diffuse Reflexion an der Wand den einzigen Mechanismus für eine Trennung der Isotope darstellt.

4.5 Wandtemperatur

Bei der MC-Simulation soll eine Rückwirkung der Umgebung auf die Strömungsverhältnisse und die Trennmechanismen vermieden werden, um die einzelnen Nichtgleichgewichte separat herausarbeiten zu können. Aus diesem Grunde entsprechen die Temperaturen der Umlenkkräfte der Eintrittstemperatur, die sich bei isoenergetischer Entspannung vom Ruhezustand bei T_0 auf die Eintrittsmachzahl $M(r/a = 0,5) = 0.9$ ergibt (Gleichung 3.3). Diese Temperatur wird auch für das Trägergasfeld vorgegeben. In technischen Standardtrenndüsen befindet sich die Wandtemperatur mit der Reservoirtemperatur (Ruhezustand T_0) im Gleichgewicht (U. Ehrfeld /8/S. 21). Werden bei Konstanthaltung aller anderen Bedingungen die Wandtemperaturen auf die Ruhetemperatur T_0 bei der MC-Simulation angehoben, so lassen sich die Einflüsse des Wärmeaustausches mit den begrenzenden Wänden und der Wärmeleitung innerhalb der Strömung auf die Nichtgleichgewichte untersuchen.

Wie in Kapitel 3.1 gesehen, bedingt die hohe Persistenz der schweren Moleküle einen Energietransport zur Umlenkwand, der beim starken Abbremsen der Teilchen in Temperaturerhöhung umgesetzt wird; diese Temperaturerhöhung bewirkt einen Wärmefluß zum Trägergas und über die Stöße mit der Umlenkwand einen Energieaustausch mit der Umgebung.

Beispielhaft zeigt die Abbildung 4.13 direkt an der Umlenkwand für das schwere Isotop den Temperaturanstieg in Richtung normal zur Umlenkwand in Abhängigkeit vom Umlenkwinkel. Der Temperaturschlupf an der Wand bildet sich sehr schnell bis zum Maximalwert von $T'_{hr} \sim 2,5$ aus ($\phi < 20^\circ$). Am Anlaufwinkel ϕ^+ überwiegen noch einmal die schnellen Moleküle, die noch keinen Wandstoß erfahren haben, so ergibt sich an dieser Stelle ein Nebenmaximum; danach fällt die Temperatur kontinuierlich bis zur Wandtemperatur, die, da die schweren Moleküle alle in einer dünnen Schicht nahe der Umlenkwand konzentriert sind, die Gleichgewichtstemperatur der Isotope darstellt. Ein Profilschnitt der Radialtemperatur am Anlaufwinkel bestätigt, daß das Temperaturgleichgewicht zwischen Isotopen und Trä-

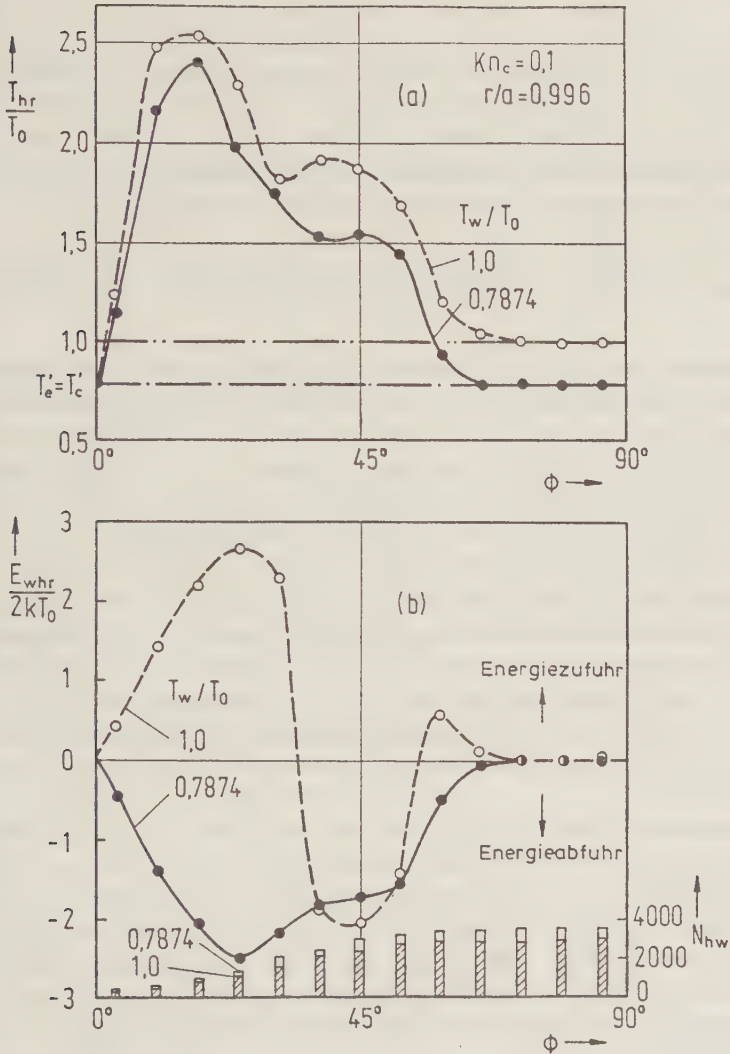


Abb. 4.13. Ergebnisse von Tracer-MC-Simulationen mit unterschiedlicher Wandtemperatur für $Kn_c=0,1$:

(a) Temperaturverlauf des schweren Isotops in radialer Richtung T_{hr} am konstanten Radius direkt an der Umlenk wand ($r/a = 0,996$) mit Eintrittstemperatur T_e/T_0 gleich Trägergasttemperatur $T_c/T_0 = 0,7874$.

(b) Vergleich des Energieaustauschs mit der Umgebung pro Wandstoß des schweren Isotops längs der Umlenk wand für zwei Wandtemperaturen T_w/T_0 ($r/a=1$; N_{hw} Anzahl der Wandstöße)

(Abweichung vom Standardfall: $T_w/T_0 = 1$)

gergas für $T_w = T_o$ größer ist und zu kleineren Radien verschoben wird.

Einen Vergleich der pro Wandstoß des schweren Isotops mit der Umlenkwand ausgetauschten Energie in Radialrichtung

$$E_{whr} = \frac{\sum_{N_w} E_{whr}}{N_w} = \left[\frac{1}{2} m_h \sum_{N_w} (v_{hr}^{-2} - v_{hr}^{+2}) \right] / N_w \quad (4.12)$$

mit N_w gleich Anzahl der Wandstöße und v_{hr}^+ Geschwindigkeit des Moleküls vor dem Wandstoß (E_w negativ bedeutet Energieabfuhr über die Umlenkwand) entnimmt man Abb. 4.13b. Im Fall $T_w' = 1,0$ übertrifft zu Anfang der Umlenkung die wahrscheinlichste thermische Geschwindigkeit der von der Wand reflektierten Moleküle $v_{hr}^- \sim \sqrt{\frac{2kT_w}{m_h}}$ die Radialgeschwindigkeit der die Wand stoßenden Moleküle, die sich aus der thermischen Geschwindigkeit (proportional zu $T_e^{1/2}$) und der überlagerten Radialkomponente aus der Vektorzerlegung des Eintrittsgeschwindigkeitsvektors am Umlenkwinkel ϕ zusammensetzt. Deshalb wird der Strömung über die Wand Energie zugeführt. Dieser Effekt wirkt sich aber wegen der geringen Zahl der Wandstöße und weil sich die Molstromfläche $\theta_u = 0,25$ zu weit von der Umlenkwand entfernt befindet, längs dieser Molstromfläche nicht auf die Trennung der Isotope aus.

Mit zunehmendem Umlenkwinkel steigt die Radialkomponente aus der Vektorzerlegung an und der Nettoenergieaustausch mit der Umlenkwand verhält sich wie bei einer Wandtemperatur T_w entsprechend der Eintrittstemperatur T_e , d.h. über die Umlenkwand wird Energie abgeführt. Nachdem alle Moleküle einen Wandstoß erfahren haben, führen die Wandstöße bei $T_w' = 1,0$ der Strömung wieder Energie zu, die Molstromflächen werden von der Wand abgedrängt und das Maximum des Trenneffekts ϵ_{Amax} verschiebt sich zu größeren Umlenkwinkeln (Abb. 4.14).

Der Gleichgewichtstrenneffekt ϵ_A^∞ ist für $\theta_u = \text{konst.}$ keine Funktion der Temperatur und unbeeinflusst vom Trägergas, solange das Geschwindigkeitsverhältnis groß ist. Die radiale Lage der konstanten Mol-

stromfläche für $\theta_u^\infty = 0,25$ läßt sich in Abhängigkeit von der Temperatur der Isotope (im Fall $Kn_c = 0,1$ nehmen die Isotope die Temperatur der Wand als Gleichgewichtstemperatur an) berechnen

$$r = [(R_{in} + a)^2 + \frac{(\ln \theta_u^\infty) \cdot 2kT_w}{m_u \omega^2}]^{1/2} - R_{in} \quad (4.13)$$

und stimmt mit den aus der MC-Simulation gewonnenen Werten gut überein.

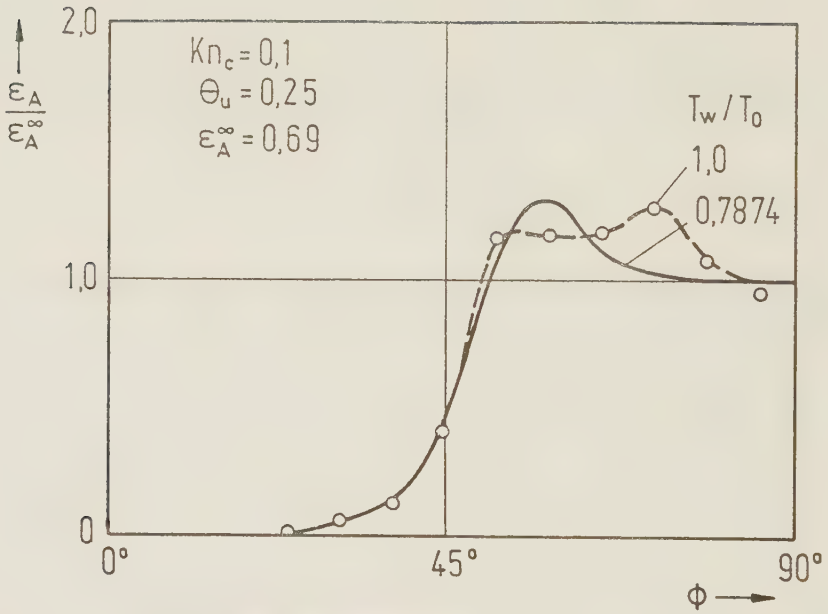


Abb. 4.14. Einfluß der Wandtemperatur auf die Isotopentrennung (Abweichung vom Standardfall: $T_w/T_0 = 1$)

5. Schlußbetrachtung

Die entwickelten Tracer- und vollständige Monte Carlo-Simulationsmethoden sind in der Lage, innerhalb erträglicher Rechenzeit die Nichtgleichgewichtseffekte einer ternären Gemischströmung in einer zylindrischen Trenndüse mit großem Massenverhältnis des Isotopengemisches zum Trägergas zu erfassen und die Auswirkungen auf die Isotopenentmischung aufzuzeigen.

Der Vorteil "numerischer Experimente" liegt in der Möglichkeit der separaten Herausarbeitung einzelner Einflüsse auf den Vorgang der Isotopenentmischung.

Das überschaubare physikalische Modell der Tracer-MC-Simulation mit dem einfachen Wechselwirkungspotential der harten Kugeln simuliert nur die Bewegung und die Stöße der Tracermoleküle im fest vorgegebenen Feld des leichten Trägergases. Die Randbedingung der mitbewegten Wand erlaubt die Vorgabe einer bekannten Gleichgewichtslösung für das Trägergas, unterdrückt Gradienten in Azimutalrichtung und läßt die Separation der Diffusionsvorgänge in Radialrichtung zu. Der Einfluß von Nichtgleichgewichtseffekten auf die Isotopenentmischung im Vergleich zu einer Kontinuumslösung unter der Voraussetzung der Chapman-Enskog-Näherung wird in diesem Fall herausgearbeitet.

Die Annahme sehr kleiner Isotopenkonzentrationen und hoher Isotopengemischmachzahl führt bei Variation der Knudsenzahl zu folgenden Ergebnissen der Tracer-MC-Simulation:

Selbst bei einer Knudsenzahl im Übergangsbereich zur Kontinuumsströmung ($Kn_c = 0,02$) zeigt sich ein maximaler Temperaturunterschied der Isotopengemischtemperatur in radialer Richtung von dreifacher Größe gegenüber der Gleichgewichtsträgergastemperatur. Das Geschwindigkeits- und Temperaturnichtgleichgewicht zwischen Trägergas und Isotopengemisch nimmt mit steigender Knudsenzahl zu, ebenso wie das Temperaturnichtgleichgewicht der Isotope

untereinander. Die Geschwindigkeitsunterschiede der beiden Isotope durchlaufen bei $Kn_C = 0,1$ ein Maximum.

Die Geschwindigkeitsverteilungsfunktion der Isotope ist in der Wandnähe im Anlaufbereich stark gestört und läßt sich nicht annähernd mit einer Maxwellverteilung beschreiben.

Die Anlaufkennzahl $Kn_C \cdot \phi$ stellt im gesamten betrachteten Knudsenzahlbereich ($Kn_C = 0,02$ bis $Kn_C \rightarrow \infty$) keine Kennzahl des Stofftrennproblems dar, wie sie es entsprechend der kontinuumsmäßigen Betrachtung der Isotopenentmischung für kleine Isotopenkonzentrationen und konstante Machzahl des Isotopengemisches ist. Die Abweichung von diesem funktionalen Zusammenhang prägt sich mit zunehmender Knudsenzahl aus.

Der Grenzwert maximalen Überschwingens im Hyperschallbereich der Isotopenströmung, der sich bei der kontinuumsmäßigen Betrachtungsweise zweier unabhängiger Systeme Trägergas - Isotop einstellt, wird nicht überschritten. Anwachsende Verdünnungseffekte vermindern das maximale Überschwingen. Die erhöhte Isotopentemperatur erniedrigt das Geschwindigkeitsverhältnis und vermindert damit die Isotopentrennung. Für $Kn_C > 1$ wird praktisch das Verhalten einer freien Molekularströmung erreicht, die intermediäre Überhöhung des Trenneffekts verschwindet, und die Einstellung der oberen Grenze der Gleichgewichtsentmischung erfolgt unabhängig von der Knudsenzahl. In diesem Fall muß erst der von der Düsengeometrie bestimmte Anlaufwinkel $\phi^\dagger$ durchlaufen werden, um über den Vorgang der Stöße mit einer diffus reflektierenden Wand eine Trennung der Isotope einzuleiten, da die diffusionshemmenden Stöße mit dem Trägergas wegen der geringen Stoßzahl keinen Beitrag zur Isotopenentmischung leisten können.

Die Wandbedingung spielt bei kleiner Knudsenzahl im Anlaufbereich keine entscheidende Rolle, der Trenneffekt überschreitet sogar bei spiegelnder Reflexion und $Kn_C = 0,02$ die obere Grenze der Gleichgewichtsentmischung, jedoch kann der Gleichgewichtszustand nur bei diffus reflektierender Wand aufrechterhalten werden.

Aus den Berechnungen geht hervor, daß bei diffuser Reflexion an der Umlenk wand am Anlaufwinkel ein Temperaturschlupf des Isotopengemisches auftritt, der 50 % über der Gleichgewichtstemperatur liegt. Im Falle der spiegelnden Reflexion und der Knudsenzahl $Kn_C = 0,1$ wird der Temperaturschlupf achtmal größer als bei diffuser Reflexion.

Eine Wärmezufuhr über die Kanalwände verschiebt den maximalen Trenneffekt zu einem größeren Umlenk Winkel und drängt den Gleichgewichtsradius der Molstromfläche für konstantes Isotopengemisch-abschälverhältnis von der Umlenk wand ab.

Die Vorgabe der Spurenkonzentration $\tilde{x}_u = 5 \cdot 10^{-2}\%$ der Isotope führt zum maximal möglichen Trenneffekt, da auch für $Kn_C = 0,02$ der Diffusionsvorgang der Isotope im Trägergas wie bei zwei unabhängigen binären Systemen Isotop - Trägergas abläuft. Eine erhöhte Isotopenkonzentration ($\tilde{x}_u = 5\%$) vermindert die maximale Isotopentrennung und die Nichtgleichgewichtseffekte, weil die erhöhte Stoßfrequenz zwischen den beiden Isotopenarten zu einem Ausgleich des lokalen Zustands beiträgt.

Die höhere Isotopenkonzentration bedingt aber eine Einstellung der Gleichgewichtsverteilung des Trägergases, da die Eintrittsdichteverteilung sich von ihr unterscheidet. Die Klärung dieses Sachverhalts kann nur mit dem Berechnungsmodell der vollständigen MC-Simulation erfolgen, das die Bewegung aller drei Gemischkomponenten erfaßt. Dabei ergibt sich im einzelnen: Ausgehend von der Eintrittsdichteverteilung entsprechend der mittleren Masse des Gemisches strebt das Trägergas in seine Gleichgewichtsdichteverteilung. Diese Bewegung der Trägergasmoleküle ist der Diffusionsrichtung der Isotope entgegengerichtet und verursacht dadurch einen Anstieg des Trenneffekts gegenüber dem Fall des festgehaltenen Trägergasfeldes. Die Dichteverteilung entsprechend der mittleren Masse des Gemisches versucht sich unabhängig von der vorgegebenen Eintrittsdichteverteilung einzustellen. Bei konstanter Eintrittsdichteverteilung sind also zu Beginn der Umlenkung die Bewegungsrichtungen von Trägergas

und Isotopen gleich und der Anlaufzeitpunkt der Trennung bestimmt sich aus dem hauptsächlichsten Trennmechanismus, der von der Knudsenzahl abhängt. Bei großer Knudsenzahl erfolgt eine Trennwirkung überwiegend durch Wandstöße und die Trennung läuft eher an als in einer Strömung mit kleiner Knudsenzahl, in der die intermolekularen Stöße mit dem Trägergas die Isotopentrennung bestimmen. Eine Auswirkung auf den maximalen Trenneffekt bei Vorgabe unterschiedlicher Eintrittsdichteverteilungen konnte nicht festgestellt werden.

Simulationen mit der Randbedingung der mitbewegten Wand zeigen den wesentlichen Einfluß der Nichtgleichgewichtseffekte in der Hauptdiffusionsrichtung der Isotope. Um die in dieser Arbeit nicht betrachtete azimutale Diffusion aufzuzeigen, muß zur Randbedingung der ruhenden Wand im zweidimensionalen Kanal übergegangen werden; das führt bei vollständiger Simulation aufgrund der Unterschallströmung und der großen thermischen Geschwindigkeit des leichten Trägergases zu Schwierigkeiten, einen stationären Zustand der Simulation zu erreichen.

Die Ergebnisse der MC-Simulation ermöglichen, weitergehend als bei den bisher verwendeten Molekularsondenmessungen zur Erfassung von Nichtgleichgewichtseffekten in Trenndüsen, eine Aufspaltung des lokal beobachteten Unterschiedes im Quotienten aus dem Geschwindigkeitsverhältnis und der Wurzel der Molekülmasse zwischen den Gemischkomponenten in einen Geschwindigkeitsunterschied und einen Unterschied der thermischen Energie der Translationsbewegung. Damit lassen sich die Temperaturvorgaben bei der Auswertung der Molekularsondenmessungen überprüfen und für die Berechnung der Gemischdaten verbessern. Außerdem können durch die MC-Simulation Geschwindigkeitsverteilungsfunktionen direkt dargestellt werden.

Der Temperatureinfluß auf die Stoßquerschnitte und damit auf die effektiven Diffusionskoeffizienten zwischen Trägergas und Isotopengemisch kann mit den ausbaufähigen MC-Simulationsprogrammen untersucht werden, wenn andere Wechselwirkungspotentiale als das ein-

fache und schnell zu berechnende Harte-Kugel-Modell eingeführt werden.

Mit den in der vorliegenden Arbeit angewandten Tracer- und vollständigen MC-Simulationen werden Berechnungsverfahren gegeben, die das komplizierte ternäre Diffusionsproblem in der zylindrischen Trenndüse lösen und alle auftretenden Nichtgleichgewichtseffekte, insbesondere hohe Diffusionsgeschwindigkeiten in der Größenordnung der Schallgeschwindigkeiten der schweren Komponenten, Temperaturunterschiede zwischen den Gemischkomponenten, Temperaturschlupf der Isotope an der Wand und starke Abweichungen von der Maxwellverteilungsfunktion der schweren Komponenten in der Nähe der Umlenkwand simulieren. Die Anwendung auf andere Strömungen mit großen Massenunterschieden der Komponenten bei Knudsenzahlen im Übergangsgebiet und auftretenden großen Nichtgleichgewichtseffekten, z.B. bei Gegenstrahl-Trenndüsen, scheint sinnvoll.

Literaturverzeichnis

- /1/ Villani S. (Ed.):
Uranium Enrichment
Topics in Applied Physics, vol. 35, Springer Verlag Heidelberg
(1979)
- /2/ Becker E.W., Nogueira Batista P., Völcker H.:
Uranium Enrichment by the Separation Nozzle Method within
the Framework of German/Brazilian Cooperation
Nuclear Technology 52, (1981), pp. 105-114.
- /3/ Cohen K.:
The Theory of Isotope Separation as Applied to the Large-
Scale Production of U-235
McGraw-Hill, New York (1951).
- /4/ Becker E.W., Bier W., Ehrfeld W. und Eisenbeiß G.:
Die physikalischen Grundlagen der Uran²³⁵-Anreicherung nach
dem Trenndüsenverfahren. Die Wirkung des leichten Zusatz-
gases
Zeitschrift für Naturforschung, 26a, 1377-1384, (1971)
- /5/ Berkahn W., Ehrfeld W., Krieg G.:
Berechnung der Uranisotopenentmischung in der Trenndüse bei
kleinen UF₆-Molenbrüchen im Zusatzgas
Institut für Kernverfahrenstechnik, Kernforschungszentrum
Karlsruhe, KfK-Bericht 2351, Karlsruhe (1976).
- /6/ Ehrfeld W.:
Elements of Flow and Diffusion Processes in Separation
Nozzles
in Springer Tracts in Modern Physics, vol. 97, Springer Ver-
lag Berlin-Heidelberg (1983)
- /7/ Bier K., Brandtstätter H., Ehrfeld U., Ehrfeld W.:
Untersuchungen des Strömungsverlaufs von He/Ar- und He/SF₆-
Gemischen in der Trenndüse mit molekular angeströmten Druck-
sonden
KfK-Bericht 1440, Kernforschungszentrum Karlsruhe, August (1971)

/8/ Ehrfeld U., Ehrfeld W.:

Untersuchungen zum Einfluß von Wärmetransportvorgängen auf den Strömungsverlauf und die Entmischung in der Trenndüse mit molekular angeströmten Druck- und Temperatursonden
KfK-Bericht 1634, Kernforschungszentrum Karlsruhe, Juli (1972)

/9/ Chatwani A.U., Fiebig M., Mitra N.K. and Ehrfeld W.:

Nonequilibrium Effects and Their Modelling in Separation Nozzles
Rarefied Gas Dynamics, Progress in Astronautics and Aeronautics, vol. 74, part I, ed. by Sam S. Fisher, AIAA, New York (1981), pp. 517-540.

/10/ Bird G.A.:

Direct Simulation and the Boltzmann Equation
The Physics of Fluids, vol. 13 no. 11 Nov. (1970), pp. 2676-2681

/11/ Bird G.A.:

Molecular Gas Dynamics
Clarendon Press, Oxford (1976)

/12/ Morse T.F.:

Kinetic Theory of Flow Between Rotating Cylinders: The Gas Centrifuge
in E. Krause, E.H. Hirschel (Hrsg.)
Strömungsmechanische Vorgänge in Gaszentrifugen, DFVLR-Kolloquium 1970, Porz-Wahn, Institut für angewandte Gasdynamik, Deutsche Forschungs- und Versuchsanstalt für Luft- und Raumfahrt e.V., Porz-Wahn (1970)

/13/ Bird G.A.:

Monte Carlo Simulation in an Engineering Context
Rarefied Gas Dynamics, Progress in Astronautics and Aeronautics, vol. 79, part I, ed. by Sam S. Fisher, AIAA, New York (1981), pp. 239-255.

/14/ Anderson J.B., Burman R.G.:

Monte Carlo Simulation of Isotope Separation at Probes
Rarefied Gas Dynamics, Progress in Astronautics and Aeronautics, vol. 51, part I, ed. by J.L. Potter, AIAA, New York (1977), pp. 49-63.

- /15/ Raghuraman P., Davidovits P., Anderson J.B.:
Isotope Separation by the Velocity-slip Process
Rarefied Gas Dynamics, Progress in Astronautics and Aeronautics, vol. 51, part I, ed. by J.L. Potter, AIAA, New York (1977), pp. 79-92.
- /16/ Fox R.L., Eaton R.R.:
Investigation of Nozzles, Jets, and Channels for the Separation of Heavy Isotopes.
Rarefied Gas Dynamics, Progress in Astronautics and Aeronautics, vol. 51, part I, ed. by J.L. Potter, AIAA, New York (1977), pp. 35-48
- /17/ Gallagher R.J., Anderson J.B.:
Isotope Separation in Crossed-jet Systems
Rarefied Gas Dynamics, ed. by R. Campargue, Commissariat a l'Energie Atomique, vol. I, Paris (1979), pp. 629-637.
- /18/ Anderson J.B., Malling G.F.:
Monte Carlo Simulation of Isotope Separation in Opposed Jets
Rarefied Gas Dynamics, Progress in Astronautics and Aeronautics, vol. 74, part I, ed. by Sam S. Fisher, AIAA, New York (1981), pp. 593-606.
- /19/ Chatwani A.U., Fiebig M., Mitra N.K., Schwan W., Bley P., Ehrfeld W. and Fritz W.:
Tracer Monte Carlo Simulation for an Isotope Separation Nozzle
Rarefied Gas Dynamics, Progress in Astronautics and Aeronautics, vol. 74, part I, ed. by Sam S. Fisher, AIAA, New York (1981), pp. 541-557.
- /20/ Fiebig M., Mitra N.K., Schwan W.:
Nichtgleichgewichtsvorgänge in Trenndüsen
Z. angew. Math. u. Mech., Bd. 63, Heft 4, T 241-244 (1983)
- /21/ Eaton R.R., Fox R.L.:
Computational Methods for Flows Involving Trace Elements and Disparate Masses
AIAA Paper 77-643, (1977)
- /22/ Jeans J.:
The dynamical theory of gases
Dover Publications Inc., Dover 4. Auflg. (1954)

/23/ Berkhahn W.:

Theoretische Untersuchungen zum Einfluß der Struktur des Zentrifugalfeldes auf die Isotopenentmischung in der Trenndüse

Diss. Fakultät für Maschinenbau der Universität Karlsruhe, Karlsruhe Juli (1977)

/24/ Kirch P., Schütte R.:

Messungen des Thermodiffusionsfaktors und Bestimmung des molekularen Wechselwirkungspotentials von gasförmigem Uranhexafluorid.

Z. Naturforschung 22a, 1532-1537 (1967)

/25/ Chapman S., Cowling T.G.:

The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases
Cambridge Univ. Press, Cambridge (1964)

/26/ Deb S.K. und Barua A.K.:

Temperature Dependence of Thermal Diffusion Factors in Ternary Gas Mixtures

The Physics of Fluids, vol. 10 No. 5, pp. 992-994 (1967)

/27/ Schütte R.:

Diffusionstrennverfahren

in Ullmanns Encyklopädie der technischen Chemie, Bartholomé E., Bieckert E., Hellmann H., Ley H. (Hg.), 4. Aufl. Band 2 Verfahrenstechnik I (Grundoperationen), Verlag Chemie Weinheim/Bergstr. S. 620-649 (1972)

/28/ Waldmann L.:

Transporterscheinungen in Gasen von mittlerem Druck, in S. Flügge (Hg.), Handbuch der Physik, Band XII, Springer Verlag Berlin-Göttingen-Heidelberg (1958)

/29/ Hamel B.B.:

Two-Fluid Hydrodynamic Equations for a Neutral, Disparate-Mass, Binary Mixture

The Physics of Fluids, vol. 9, no. 1, pp. 12-22 (1966)

/30/ Bird G.A.:

The velocity distribution function within a shock wave
J. Fluid Mech. vol. 30, part 3, pp. 479-487 (1967)

/31/ Mott-Smith H.M.:

The Solution of the Boltzmann Equation for a Shock Wave
Phys. Rev. 82, 895-892 (1951)

/32/ Schmidt E.:

Untersuchungen mit molekular angeströmten Sonden zum räumlichen Verlauf der Isotopenentmischung in der Trenndüse bei Rückstau der schweren Fraktion
Dissertation Fakultät für Maschinenbau der Universität Karlsruhe, Karlsruhe (1979)

/33/ Hamel B.B.:

Disparate Mass Mixture Flows
Rarefied Gas Dynamics, vol. 51, part I, ed. by J.L. Potter,
AIAA Progress in Astronautics and Aeronautics, (1977), pp. 171-195

/34/ Schwan W.:

Monte Carlo-Simulationsprogrammssystem zur Berechnung von Gasströmungen mit Komponenten stark unterschiedlicher relativer Molekülmasse in Kanälen.
- Programmdokumentation -
Arbeitsbericht, Institut für Thermo- und Fluidodynamik, Ruhruniversität Bochum, WS 83/84, Bochum 1983

A I Relaxationszeiten der Modellgase

1. Binäre Gemische

Der zeitliche Ablauf, in einer Strömung vom Nichtgleichgewichtszustand in einen Gleichgewichtszustand zu gelangen, wird durch Relaxationszeiten τ_{Rel} beschrieben. Die Bezugsgröße bildet eine charakteristische Strömungszeit τ_s , die durch die Strömungszeit, um von Kanalmitte bis zur Umlenk wand mit der mittleren Strömungsgeschwindigkeit zu gelangen, ausgedrückt wird $\tau_s = a/(2v_\phi)$. Sehr große Werte τ_{Rel}/τ_s kennzeichnen einen langsamen Abbau einer Störung durch die intermolekularen Stöße, kleine Werte hingegen ein augenblickliches Einstellen des lokalen thermodynamischen Gleichgewichts. In einem Zweikomponentengas, z.B. Trägergas (c) und Isotopengemisch (u), lassen sich folgende Relaxationszeiten mit den Stoßfrequenzen und Massenverhältnissen definieren:

Relaxation einer Nichtgleichgewichtsgeschwindigkeitsverteilung zur Maxwell-Geschwindigkeitsverteilung

$$\tau_c = (v_{cc} + \mu_{uc} v_{cu})^{-1}$$

$$\tau_u = (v_{uu} + \mu_{cu} v_{uc})^{-1}$$

Relaxation von Geschwindigkeits- und Temperaturunterschieden zwischen den Komponenten

$$\tau_{\Delta v} = (\mu_{uc} v_{cu} + \mu_{cu} v_{uc})^{-1}$$

$$\tau_{\Delta T} = (v_{cu} \mu_{uc} \mu_{cu} / \bar{x}_u)^{-1}$$

Dabei gelten die folgenden Beziehungen für

die Relaxationszeiten $\tau_{ij} = 1/(\mu_{ji} \cdot v_{ij})$,

die Stoßfrequenzen $v_{ij} = n_j \cdot \Omega_{ij} \bar{v}_{ij}$,

die mittleren Relativgeschwindigkeiten $\bar{v}_{ij} = [8 kT (m_i + m_j) / (\pi m_i \cdot m_j)]^{1/2}$,

und die Massenverhältnisse $\mu_{ji} = m_j / (m_i + m_j)$; $\mu_{ii} = 1$.

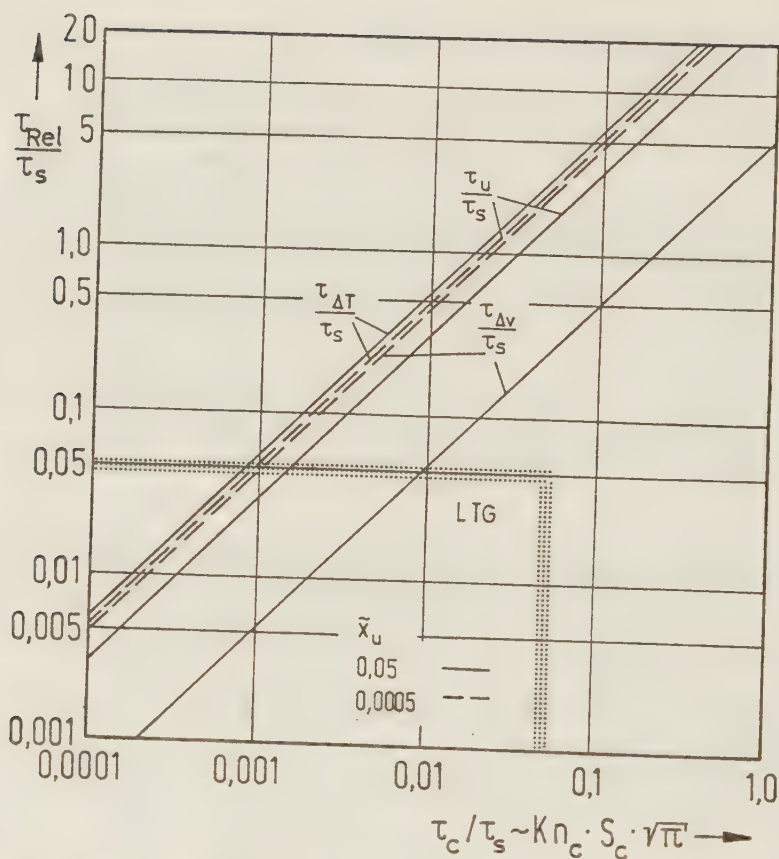


Abb. A I 1. Auf die Strömungszeit $\tau = a/(2v_u)$ bezogene Relaxationszeitverhältnisse binärer Gasgemische mit großem Massenverhältnis $\tilde{m}_u/\tilde{m}_c = 175$, $\tilde{m}_u = 350$ für unterschiedliche Isotopengemischkonzentrationen $\tilde{x}_u$. Relaxationszeiten der Geschwindigkeitsverteilung einer Komponente τ_u und τ_c sowie der Temperatur- $\tau_{\Delta T}$ und Geschwindigkeitsunterschiede $\tau_{\Delta v}$ zwischen den Komponenten. (LTG ungefähre Grenze des lokalen thermodynamischen Gleichgewichts)

Die Verhältnisse bezogen auf die mittlere Strömungszeit des Modellgases ($\bar{m}_c = 2$; $\bar{m}_u = 350$; $\Omega_{uu}/\Omega_{cc} = 6,0$; $\Omega_{cu} = \Omega_{uc}$; $\Omega_{cu}/\Omega_{cc} = 3,0$) sind in Abb. A11 ausgewertet. Das Verhältnis τ_c/τ_s entspricht für kleine Isotopenkonzentrationen dem Produkt $Kn_c \cdot S_c \cdot \sqrt{\pi}$. Die Bedingungen in der realen Düse und für die MC-Simulation führen zu folgenden Größen:

	Reale Düse	Modellrechnungen (Standardfall)			
	$\tilde{x}_u = 5 \%$	$\tilde{x}_u = 5 \cdot 10^{-2} \%$		$\tilde{x}_u = 5 \%$	
M	0,4	0,9		0,9	
S_c	0,12	0,78		0,26	
Kn_c	0,01	0,1	0,02	0,1	0,02
$Kn_c S_c \sqrt{\pi}$	0,002	0,14	0,028	0,026	0,005
$\sim \tau_c/\tau_s$					

Danach kann für den Standardfall das Trägergas angenähert im lokalen thermodynamischen Gleichgewicht (LTG) angenommen werden. Für $\tilde{x}_u = 5 \cdot 10^{-2} \%$ sind alle anderen Relaxationszeiten ungefähr gleich groß $\tau_{\Delta T} \sim \tau_u \sim \tau_{\Delta V}$ und werden durch die Effektivität der Stöße des Isotopengemisches mit dem Trägergas bestimmt ($c - u$; $u - c$). Ein Isotopenanteil von $\tilde{x}_u = 5 \%$ spreizt die Relaxationszeit des Ausgleichs der Geschwindigkeitsunterschiede in Richtung Gleichgewicht von $\tau_{\Delta T}$ ab, so daß ungefähr die Relation $\tau_{\Delta T} \sim 3 \tau_u \sim 10 \tau_{\Delta V}$ für konstantes τ_c/τ_s gilt. τ_c/τ_s liegt wegen des kleineren Geschwindigkeitsverhältnisses noch sicherer am lokalen thermischen Gleichgewicht.

2. Ternäre Gemische

Die für die Nichtgleichgewichtseffekte bei der Isotopenmischung interessierenden Relaxationszeiten ternärer Gasgemische mit stark unterschiedlichen relativen Molekülmassen wurden von Chatwani /9/ auf der Grundlage einer Arbeit von Hamel /33/ untersucht.

Als Modell werden von Hamel die Stoßmomente entsprechend der Form von Maxwell-Molekülen angenommen, aber mit Stoßquerschnitten, die eine "Harte Kugel"-Abhängigkeit der Relativgeschwindigkeit darstellen. Dann lauten die dimensionslosen Gleichungen der Geschwindigkeitsunterschiede /9/:

$$10^2 K_{n_{cc}} S_c \sqrt{\pi} \frac{\partial}{\partial t^*} (v_c - v_h) = - \underbrace{(\tau_{ch}^{-1} + \tau_{hc}^{-1} + \tau_{cl}^{-1}) / (10^2 \tau_{cc})^{-1}}_{K_{11}} (v_c - v_h) + \dots$$

$$\dots + \underbrace{(\tau_{cl}^{-1} + \tau_{hl}^{-1}) / (10^2 \tau_{cc})^{-1}}_{K_{12}} (v_l - v_h)$$

$$10^2 K_{n_{cc}} S_c \sqrt{\pi} \frac{\partial}{\partial t^*} (v_l - v_h) = + \underbrace{(\tau_{lc}^{-1} + \tau_{hc}^{-1}) / (10^2 \tau_{cc})^{-1}}_{K_{21}} (v_c - v_h) - \dots$$

$$\dots - \underbrace{(\tau_{lh}^{-1} + \tau_{hl}^{-1} + \tau_{lc}^{-1}) / (10^2 \tau_{cc})^{-1}}_{K_{22}} (v_l - v_h)$$

$$t^* = t / \tau_s ; \quad \tau_{ij} = (\nu_{ji} \nu_{ij})^{-1} .$$

Die Auswertung der Gleichungen für das MC-Simulationsmodellgas mit $\tilde{m}_u = 350$, $\tilde{m}_c = 2$, $\tilde{x}_u \tilde{m}_u = \tilde{x}_h \tilde{m}_h + (\tilde{x}_u - \tilde{x}_h) (\tilde{m}_h - \Delta \tilde{m})$ und den Stoßquerschnittsverhältnissen zwischen schweren und leichten Komponenten wie beim binären Gas zeigt, daß K_{11} immer groß gegen K_{12} und K_{22} immer groß gegen K_{21} wird. Dabei variiert die Isotopenkonzentration zwischen $\tilde{x}_u = 5 \%$ und $5 \cdot 10^{-2} \%$ und das Verhältnis der Isotopenkonzentrationen zwischen $\tilde{x}_l / \tilde{x}_h = 1$ und $0,02$. Die Differenz der relativen Isotopenmassen $\Delta \tilde{m}$ liegt zwischen 3 und 150. Die Faktoren (K) in den Gleichungen der Geschwindigkeitsdifferenzen können als Kehrwerte der Relaxationszeiten der Prozesse aufgefaßt werden.

Im Fall gleicher Größenordnungen der Geschwindigkeitsdifferenzen $(v_c - v_h)$ und $(v_l - v_h)$ beschreibt das Verhältnis K_{11}/K_{22} die Relaxation der Isotopentrennung zur Gemischtrennung. In symbolischer Schreibweise gilt

$$K_{11}/K_{22} = \tau (v_l - v_h) / \tau (v_c - v_h) .$$

Die Möglichkeit des Überschwingens des Trenneffekts über den

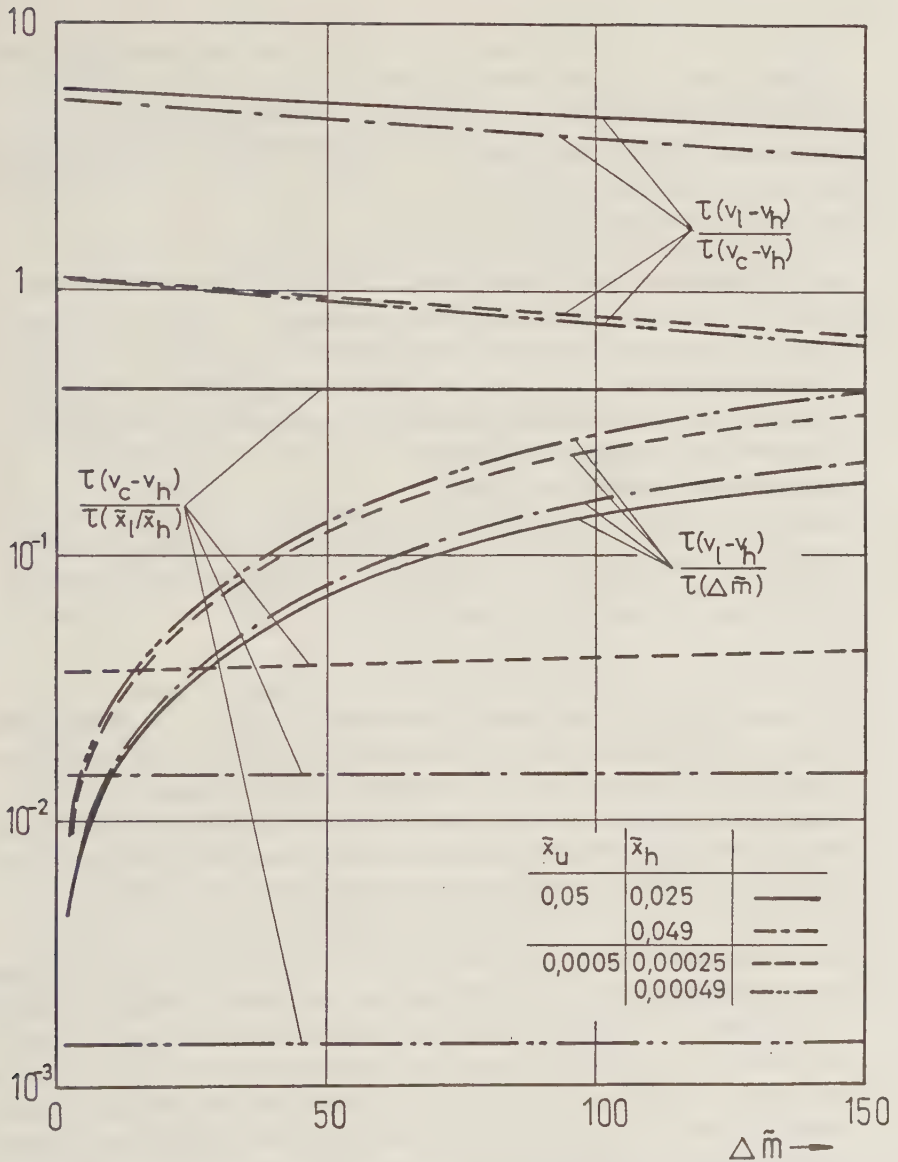


Abb. A I 2. Einfluß der Differenz der relativen Isotopenmassen $\Delta \tilde{m}$ und der Verteilung der Isotope im Isotopengemisch $\tilde{x}_u = \tilde{x}_l + \tilde{x}_h$ für unterschiedliche Isotopengemischkonzentrationen $\tilde{x}_u$ auf die Verhältnisse der Geschwindigkeitsrelaxationszeiten ternärer Gemische mit konstanter Isotopengemischmasse $\tilde{m}_u = 350 = [\tilde{x}_h \tilde{m}_h + (\tilde{x}_u - \tilde{x}_h)(\tilde{m}_h - \Delta \tilde{m})] / \tilde{x}_u$, $\tilde{m}_c = 2$.

Gleichgewichtstrenneffekt wächst mit steigendem Verhältnis der Relaxationszeiten, da dann die Isotopentrennung im Vergleich zur Gemischtrennung länger aufrecht erhalten wird.

Das Verhältnis K_{21}/K_{22} kennzeichnet den Einfluß der Veränderung der Massendifferenz.

$$K_{21}/K_{22} = \tau (v_l - v_h) / \tau (\Delta \tilde{m})$$

Da die Trägergasmasse immer klein gegen die Isotopenmasse ist $\tilde{m}_c \ll \tilde{m}_i$ ($i = l, h$), sind alle Relaxationszeiten τ_{ij} mit $i = l$ oder h und $j = c$ wegen $\mu_{ji} = m_j / (m_i + m_j)$ stark beeinflusst, wenn sich die Massendifferenz ändert. Das geschieht beim Faktor K_{21} . Wächst $\tau (v_l - v_h) / \tau (\Delta \tilde{m})$ an, so bleibt die Geschwindigkeitsdifferenz zwischen den Isotopen länger erhalten und das Überschwingen des Trenneffekts vergrößert sich.

Im Verhältnis K_{12}/K_{11} spiegelt sich in erster Linie die Abhängigkeit der Konzentrationsverteilung im Isotopengemisch wider.

$$K_{12}/K_{11} = \tau (v_c - v_h) / \tau (\tilde{x}_l / \tilde{x}_h)$$

In der Relaxationszeit τ_{ij} bestimmt der Index j wegen $v_{ij} = n_j \Omega_{ij} \bar{v}_{ij}$ die einzusetzende Dichte. Mit $j = l$ oder h ändert sich K_{12} am stärksten, da die Dichte des Trägergases immer nahezu der Gesamtdichte entspricht $n_c = \tilde{x}_c n$. Wächst $\tau (v_c - v_h) / \tau (\tilde{x}_l / \tilde{x}_h)$, so resultiert aus dem langsameren Ausgleich der Geschwindigkeitsdifferenz zwischen Trägergas und Isotopengemisch ein negativer Einfluß auf das Überschwingen des Trenneffekts.

Die Größenordnungen der Relaxationszeitverhältnisse untereinander in Abhängigkeit von der Differenz der relativen Isotopenmassen und von der Verteilung der Isotope im Isotopengemisch sind in Abb. AI2 dargestellt. Das erleichtert die Interpretation der Simulationsergebnisse zum Einfluß der Massendifferenz und des Konzentrationsverhältnisses der Isotope, weil mit den oben angegebenen Auswirkungen bei Änderung der Verhältnisse die Entwicklung der Trenneffekts beschrieben werden kann.

A II Monte Carlo-Simulationsprogrammssystem

Das entwickelte Programmsystem /34/ benutzt die direkte Monte Carlo-Simulationsmethode von Bird /11/ und erlaubt die Erfassung und Untersuchung von Nichtgleichgewichtseffekten, insbesondere der Abweichungen von der Maxwell'schen Gleichgewichtsgeschwindigkeitsverteilung einer Kanalströmung mit Gasgemischen stark unterschiedlicher relativer Molekülmassen im Bereich verdünnter Gase. Die Separation von Einflußfaktoren erleichtert das Verständnis und die physikalische Interpretation von Nichtgleichgewichtseffekten. Zum Beispiel schaltet das Tracer-Verfahren die Rückwirkung der schweren Komponenten auf das leichte Trägergas aus, bei der diffus reflektierenden mitbewegten Wand werden die radialen Gradienten der Umfangsgeschwindigkeit unterdrückt, die spiegelnde Wandreflexion gestattet keinen Energieaustausch mit der Wand und keine Trennwirkung, und die eindimensionale instationäre Simulation rechnet ohne Geschwindigkeitsunterschiede in Hauptströmungsrichtung. Die Möglichkeiten der Verknüpfung von Bedingungen und Programmteilen lassen sich der Abbildung A II 1 entnehmen.

Das Schema ist in Pfeilrichtung und nach einer Querverbindung niemals aufwärts zu lesen. Die unterbrochenen Linien kennzeichnen Sonderteile, die das Überspringen der Stoßberechnung bei freier Molekularströmung und die eindimensionale Simulation im geraden Kanal mit aufgeprägter Kraft ausführen. Die Wahl der Bedingungen erfolgt zum großen Teil durch Steuerung über Kennzahlen, die zum Programmstart eingelesen werden, ebenso wie die Parametervorgaben für Geometrie, molekulare Daten, Konzentration und Strömung.

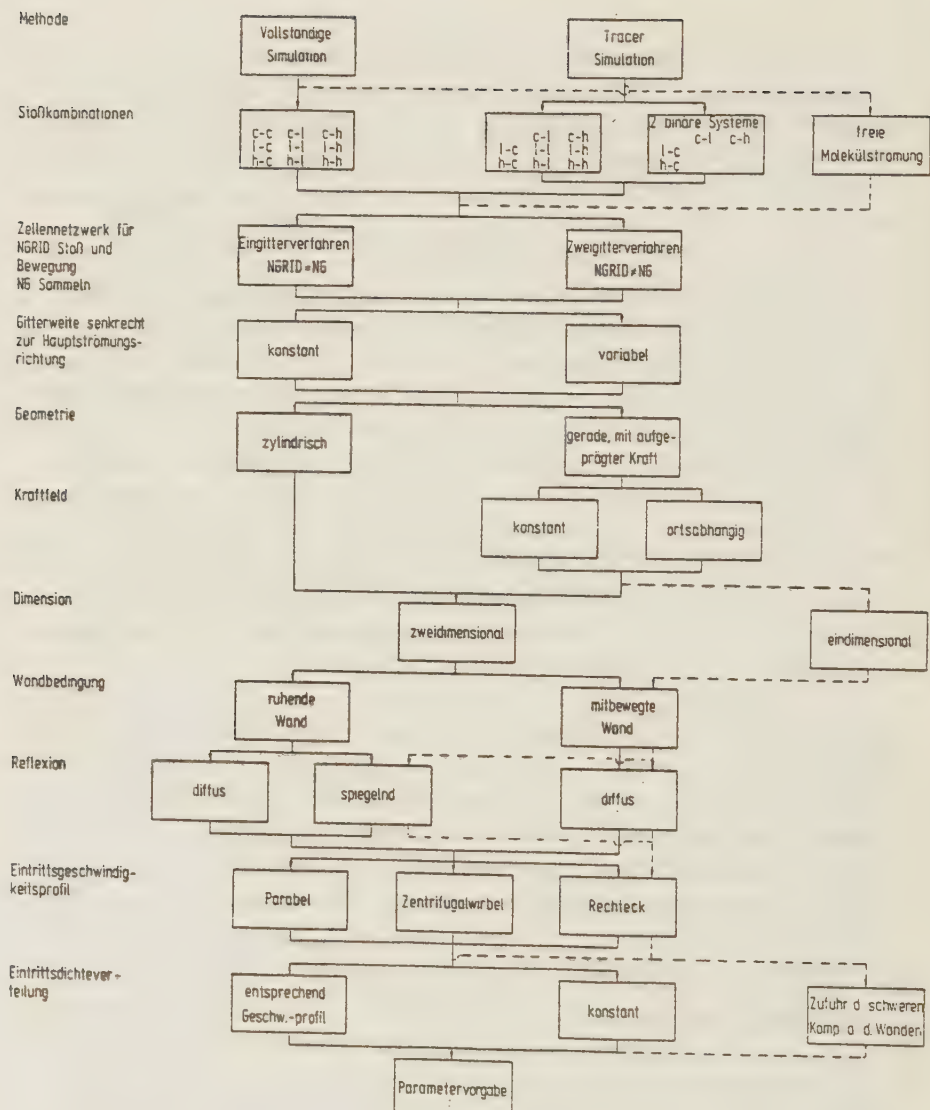


Abb. A II 1. Verknüpfungsmöglichkeiten des Monte Carlo-Simulationsprogrammsystems.

Parameter

Geometrie

Verhältnis Kanalbreite zu Umlenkwandradius $a/(a+R_{in})$

molekulare Daten

Verhältnis der Moleküldurchmesser der schweren Komponente zum leichten Trägergas	$\frac{d_u}{d_c}$
Massenverhältnis des Gemisches der schweren Komponenten zum leichten Trägergas	$\frac{\tilde{m}_u}{\tilde{m}_c}$
Massendifferenz der schweren Komponenten	$\Delta\tilde{m} = \tilde{m}_h - \tilde{m}_l$

Konzentration

Konzentration des Gemisches der schweren Komponenten	$\tilde{x}_u = \tilde{x}_h + \tilde{x}_l$
Verhältnis der Konzentrationen der schweren Komponenten untereinander	$\tilde{x}_l / \tilde{x}_h$

Strömung

Knudsenzahl	Kn_c
Machzahl des Gemisches	M

Der in Kapitel 3 zugrundegelegte Standardfall folgt dem Weg:

Tracer-Simulation - Berechnung aller Stoßkombinationen außer reiner Trägergasstöße - Zweigitterverfahren mit variabler Gitterweite - zylindrische Geometrie - zweidimensional - mitbewegte Wand - diffuse Reflexion - Eintrittsgeschwindigkeitsprofil Zentrifugalwirbel - Eintrittsdichtevertelung entsprechend Geschwindigkeitsprofil und mittlerer Masse.

Der Programmablaufplan (Abb. A II 2) gliedert sich nach der Hierarchie der Simulationszeit ausgehend von der Anfangszeit in kleinen Zeitschritten der Bewegung.

t_0 Anfangszeit

Anfangsbedingungen festlegen

Δt_m Zeitschritt der Bewegung

Bewegung und Stoßberechnung mit Fortschreibung des Stoßzählers Δt_c

Δt_s Sammeln der Moleküldaten in einer Zelle p

z.B. $\sum v_{iqp}$ (i = Komponente; q = Richtung ϕ, r, z)

t_{st} Stationärer Zustand

eintretende Moleküle gleich austretende Moleküle

Δt_p Druckzeit

Berechnung makroskopischer Feldgrößen und Drucken von Zwischenergebnissen

z.B. $\bar{v}_{iqp} = \sum v_{iqp} / N_{ip}$ (N_{ip} Probengröße)

t_{lim} Grenzzeit der Simulation

Berechnung: Trenneffekt, Geschwindigkeitsverteilungsfunktion. Drucken der Feldgrößen.

Alle Zeiten bilden ganzzahlige Vielfache des Zeitschritts der Bewegung.

A III Fehlerbetrachtung bei der Berechnung des Trenneffekts

Die Ergebnisse der Monte Carlo-Simulation unterliegen statistischen Schwankungen, die umso kleiner sind, je größer die Probengröße N ist, aus der sie gewonnen werden. Für die direkt berechneten makroskopischen Feldgrößen gilt nach Bird /11/ die direkte Proportionalität zwischen mittlerer statistischer Abweichung Δ und dem Quotienten $1/\sqrt{N}$. Bei der Tracer-Simulation wurde gefunden, daß diese Proportionalität auch für die Isotopenabschälverhältnisse gilt, damit läßt sich der Fehler bei der Berechnung des Trenneffekts ϵ_A abschätzen.

Ausgehend von Gleichung (3.24) und bei Anwendung des Fehlerfortpflanzungsgesetzes erhält man

$$\epsilon_A = \frac{\theta_1}{(1 - \theta_1)} \cdot \frac{(1 - \theta_h)}{\theta_h} - 1$$

$$\Delta \epsilon_A = \sqrt{\Delta \theta_1^2 \left(\frac{\partial \epsilon_A}{\partial \theta_1} \right)^2 + \Delta \theta_h^2 \left(\frac{\partial \epsilon_A}{\partial \theta_h} \right)^2}$$

$$\frac{\partial \epsilon_A}{\partial \theta_1} = \left[\frac{1}{(1 - \theta_1)^2} \frac{(1 - \theta_h)}{\theta_h} \right]$$

$$\frac{\partial \epsilon_A}{\partial \theta_h} = \left[- \frac{1}{\theta_h^2} \frac{\theta_1}{(1 - \theta_1)} \right]$$

$\Delta \theta_i$ ist der mittlere Fehler des Abschälverhältnisses der Komponente i . Macht man die Voraussetzung

$$\Delta \theta_1 = \Delta \theta_h = \Delta \theta_u$$

und beschreibt die θ_i durch θ_u

$$\theta_1 = \theta_u (1 + \gamma_1) ; \theta_h = \theta_u (1 - \gamma_h) \quad \theta_1 \geq \theta_h$$

so gilt für $\tilde{x}_1 = \tilde{x}_h$ $\gamma_1 = \gamma_h = \gamma$ mit

$$\gamma = \frac{\theta_1 - \theta_h}{2 \theta_u} .$$

Der mittlere Fehler des Trenneffekts lautet dann

$$\Delta \epsilon_A = \sqrt{\Delta \theta_u^2 \left\{ \frac{1 - \theta_u(1-\gamma)}{[1 - \theta_u(1+\gamma)]^2 \cdot \theta_u(1-\gamma)} \right\}^2 + \Delta \theta_u^2 \left\{ \frac{\theta_u(1+\gamma)}{[\theta_u(1-\gamma)]^2 [1 - \theta_u(1+\gamma)]} \right\}^2}$$

Bildet man die relativen mittleren Fehler

$$\frac{\Delta \epsilon_A}{\epsilon_A} \cdot \frac{\theta_u}{\Delta \theta_u} = \frac{\theta_u}{\epsilon_A} \left\{ \frac{[1 - \theta_u(1-\gamma)]^2 [\theta_u(1-\gamma)]^2 + [\theta_u(1+\gamma)]^2 [1 - \theta_u(1+\gamma)]^2}{[1 - \theta_u(1+\gamma)]^4 [\theta_u(1-\gamma)]^4} \right\}^{1/2}$$

$$\frac{\Delta \epsilon_A}{\epsilon_A} \cdot \frac{\theta_u}{\Delta \theta_u} = \frac{\theta_u}{\epsilon_A} K(\theta_u; \gamma) ,$$

so ergibt sich eine Abhängigkeit von θ_u und γ sowie ϵ_A für vorgegebenes θ_u .

Der Trenneffekt kann unter den oben gemachten Voraussetzungen ebenfalls als Funktion von θ_u und γ beschrieben werden

$$\epsilon_A = \frac{\theta_u(1+\gamma) - \theta_u(1-\gamma)}{\theta_u(1-\gamma) [1 - \theta_u(1+\gamma)]} .$$

Das Verhältnis von relativem mittleren Fehler des Abschälverhältnisses $\delta \theta_u$ zu dem des Trenneffekts $\delta \epsilon_A$ ist nur eine Funktion von θ_u und γ und somit Funktion von θ_u und der Differenz der Abschälverhältnisse der Isotope $\theta_1 - \theta_h$.

$$\frac{\delta \theta_u}{\delta \epsilon_A} = K^*(\theta_u; \theta_1 - \theta_h)$$

Diese Auftragung in Abb. A III 1 erleichtert im Arbeitsbereich

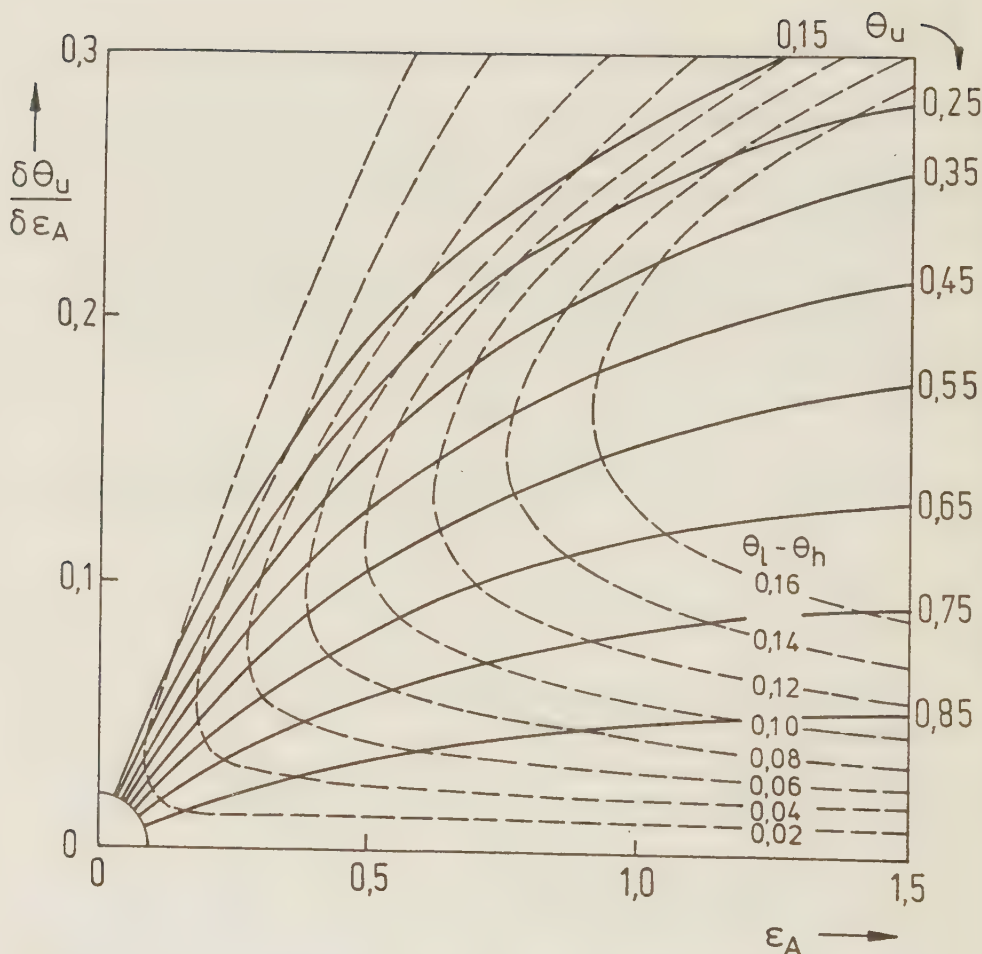


Abb. A III 1. Quotient der relativen mittleren Fehler aus Isotopengemischabschälverhältnis $\delta\theta_u$ und Trenneffekt $\delta\epsilon_A$ als Funktion des Trenneffekts ϵ_A mit den Parametern Isotopengemischabschälverhältnis θ_u und Differenz der Isotopenabschälverhältnisse $(\theta_l - \theta_h)$.

($0,2 < \epsilon_A < 1,5$; $\theta_u = 0,25$) das Ablesen.

Hier sei noch einmal auf die Voraussetzungen der Ableitung hingewiesen

1. Die absoluten Fehler der Abschälverhältnisse des Urans und der Isotope sind gleich groß
2. Die Konzentrationen der Isotope im Ausgangsgemisch sind gleich groß.

Die erste Voraussetzung wird für kleine Differenzen der Abschälverhältnisse gut erfüllt sein. Je größer die Differenz $\theta_l - \theta_h$ besonders für kleine θ_u wird, desto mehr gerät die Größenordnung des absoluten Fehlers des schweren Isotops in die Größenordnung des Abschälverhältnisses des schweren Isotops selbst. Das führt zu unrealistisch großen relativen Fehlern des Abschälverhältnisses des schweren Isotops.

Die zweite Voraussetzung gilt nicht für die natürliche Verteilung der Isotope. Im natürlichen Isotopengemisch ist die Konzentration des leichten Isotops wesentlich geringer, was den funktionalen Zusammenhang kompliziert (Die Gleichung für $\Delta\epsilon_A$ müßte dann für γ_l und γ_h entwickelt werden).

Mit Abbildung A III 1 läßt sich in jeder Zelle der Fehler des berechneten Trenneffekts abschätzen. So ist der relative Fehler $\delta\epsilon_A$ für $\epsilon_A = 0,7$ und $\theta_u = 0,25$ (Gleichgewichtswert für $\Delta\bar{m} = 100$) angenähert um den Faktor 5 ($1/(\delta\theta_u/\delta\epsilon_A) = 1/0,21$) größer als der relative Fehler des Abschälverhältnisses, der sich mit der Probengröße in der Zelle p zu $\delta\theta_u \sim 1/\sqrt{N_p}$ berechnen läßt.

Allgemein gilt:

- $\delta\epsilon_A$ nimmt für größer werdendes ϵ_A bei konstantem θ_u und $\delta\theta_u$ ab, aber der absolute Fehler $\Delta\epsilon_A$ steigt.
- Für $\epsilon_A > 1,5$ ändert sich $\delta\epsilon_A$ für konstantes $\delta\theta_u$ nur noch geringfügig.
- Die Differenz ($\theta_l - \theta_h$) nimmt für konstantes ϵ_A für $\theta_u = 0,5$ die größten Werte an und wird kleiner in Richtung $\theta_u \rightarrow 0$ und $\theta_u \rightarrow 1$.

Lebenslauf

Wolfgang Schwan

23. August 1946

geboren in Peine

Schulbildung

1953 - 1957

Volksschule Peine

1957 - 1963

Gunzelin Realschule Peine

Lehre

1963 - 1966

Maschinenschlosser

Ilse der Hütte/Stahl- und Walzwerke Peine

Wehrdienst

1966 - 1968

Bundeswehr

Studium

Sept. 1968 - Feb. 1972

Maschinenbau, Verfahrenstechnik
Fachhochschule Hannover
Ing. (grad.) 3. Feb. 1972

Okt. 1974 - März 1979

Maschinenbau, Verfahrenstechnik
Ruhr-Universität Bochum
Diplom 30. März 1979

Berufliche Tätigkeit

Mai 1966 - Sept. 1966

Maschinenschlosser
Ilse der Hütte/Stahl- und Walzwerke Peine

Juli 1972 - Sept. 1974

Verfahreningenieur
Fried. Krupp GmbH, Krupp Chemieanlagen-
bau, Essen

Nov. 1974 - April 1976

freier Mitarbeiter
Krupp Koppers GmbH, Essen

Feb. 1975 - April 1975
und Feb. 1976

freier Mitarbeiter
Ruhr-Universität Bochum, Technische Chemie
(Prof. Dr. M. Baerns)

seit April 1979

Wissenschaftlicher Angestellter
Institut für Thermo- und Fluidodynamik der
Ruhr-Universität Bochum, Lehrstuhl für
Wärme- und Stoffübertragung
(Prof. Dr.-Ing. M. Fiebig)
(Okt. - Dez. 1982 Vorlesungstätigkeit an
der Tongji-Universität Shanghai, VR China)

W. Schwan

